Technische Universität Dresden
- Sektion Elektronik-Technologie
und Feingerätetechnik -

November 1975

Lernhilfe zur Vorlesung "Elektrophysik"

Diese Lernhilfe ist weder ein Lehrbuch noch eine Niederschrift der Vorlesung. Ihr Ziel besteht darin, Erfassung, Verständnis und Interpretation grundlegender Zusammenhänge zu erleichtern.

Prof.Dr.-Ing.habil. W. Hartmann

1. Elektrophysik beschäftigt sich mit dem Verhalten von elektrischen Ladungsträgern in ihrer Umwelt, z.B. mit den Eigenschaften von Elektronen im Halbleiter Silizium. Prinzipielle Schwierigkeit bei Untersuchung und Verständnis dieser atomaren Mikrowelt: die dem Menschen mit Hilfe seiner Sinne unmittelbar mögliche Wahrnehmung der ihn umgebenden materiellen Welt, von der er selbst ein Teil ist, ist außerordentlich begrenzt. Seine Erfahrungen beschränken sich auf Erscheinungen, an denen Objekte eines relativ engen Größenbereichs beteiligt sind:

Massen: $\approx 10^{-50}$ kg (Neutrino) bis $\approx 10^{40}$ kg (Sterne)
Erfahrungen mit ≈ 1 mg bis ≈ 10 t

Schwingungen: < 1 Hz bis $\approx 10^{20}$ Hz
Erfahrungen mit $\approx 4 \cdot 10^{14}$ Hz bis $\approx 8 \cdot 10^{14}$ Hz (sichtbares Licht)

Geeignete und leistungsstarke Denkzeuge zur Beherrschung dieser "üblichen" Umwelt hat die sog. klassische Physik erarbeitet:

Gebiet	Experimente	Theorie	Gesetze
Mechanik	Galilei	1687 Newton	$\dot{\vec{p}} = \vec{F}$ (1)
Elektrodynamik	Ampere, Faraday u.a.	1864/73 Maxwell	$\mathrm{rot}\,\vec{E} = -\mu \cdot \frac{\partial \vec{H}}{\partial t}$
			$\mathrm{rot}\,\vec{H} = \varepsilon \cdot \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \vec{G}$ (2)

(Die angeführten Gesetze der genannten Gebiete sind die die entsprechenden Theorien typisch kennzeichnenden, jedoch nicht umfassend darstellenden Ergebnisse. Auf vollständige Wiedergabe wurde verzichtet.)
Diese Gesetze wurden nicht aus übergeordneten Axiomen abgeleitet, sondern durch geniale Interpretation experimentell gefundener Zusammenhänge entdeckt. Dies gilt auch für die Aufstellung der grundlegenden Gesetze, die das Verhalten der Mikrowelt beschreiben.
Bei der Untersuchung dieser atomaren Mikrowelt wurden Erscheinungen gefunden, die der unmittelbaren Erfahrung des Menschen fremd sind: Anschaulichkeit geht verloren. Zur besseren Verdeutlichung

verwendet man jedoch oft vereinfachte, bildlich faßbare Denkmodelle: in jedem Fall muß aber die begrenzte Gültigkeit derartiger Verständnishilfen sorgfältig beachtet werden!

Gebiet	Experiment	Theorie	Gesetze	
Quantenphysik	Rubens, Kurlbaum	1900 Planck	$W = h \cdot \nu$	(3)
Wellenmechanik		1924/26 *de Broglie* Heisenberg, Born, Schrödinger u.a.	$\Delta\psi - \frac{8\pi^2 m}{h^2} \cdot W_{pot} \cdot \psi = -\frac{4\pi i m}{h} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial t}$	(4)

Gleichung (3) drückt die Gesetzmäßigkeit der Mikrowelt aus, daß Energie gequantelt ist, also z. B. ein schwingungsfähiges Gebilde der Mikrowelt, ein Oszillator, im Gegensatz zu den Aussagen der klassischen Physik der Makrowelt nur bestimmte, nicht aber beliebige Energiewerte annehmen kann: Entdeckung der Quantenphysik. Gleichung (4) macht eine Aussage über die orts- und zeitabhängige Wahrscheinlichkeit

$$dP = \psi \cdot \psi^* \cdot dV \qquad (5)$$

das Teilchen der Masse m mit der potentiellen Energie W_{pot} im Volumenelement dV anzutreffen: Quanten- oder Wellenmechanik. Diese hat sich zur Erklärung der vielfältigen Erscheinungen der atomaren Mikrowelt glänzend bewährt: dies gilt für die Anwendung auf Transistoren ebenso wie für die Elektrizitätsleitung in Metallen, für die Spektroskopie, die Elektronenemission aus festen Körpern, um nur einige Beispiele zu nennen.

In der Welt der Atome beruhen alle Erscheinungen auf dem fesselnden Wechselspiel zwischen der elektrostatischen Anziehung von positivem Atomkern und den negativen Elektronen einerseits sowie den wellenmechanischen Eigenschaften der Elektronen andererseits: zwischen einem Proton und einem Elektron im Abstand r wirken die Kräfte der

elektrischen Anziehung $$F_{el} = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{e^2}{r^2} \qquad (6)$$

und der Massenanziehung $$F_{gr} = \gamma \cdot \frac{m \cdot m_p}{r^2} \qquad (7)$$

$$\frac{F_{el}}{F_{gr}} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 \cdot \gamma \cdot m \cdot m_p} = 2{,}3 \cdot 10^{39} \text{ , somit } F_{el} \gg F_{gr}$$

Daß Proton und Elektron bei so starker Anziehung nicht ineinander fallen, verbieten die Gesetze der Wellenmechanik.

Der Bereich der Atomphysik ist unsere irdische Umwelt mit Energieumsetzungen einiger eV. Sie befaßt sich mit den die Atomkerne umgebenden Elektronenschalen. Die Chemie der Atome hat eine sehr große Mannigfaltigkeit: auf verschiedenste Art bilden sich Moleküle, Verbindungen aus sehr vielen Atomen, große Kristalle usw. - Die Chemie der Atomkerne ist viel weniger mannigfaltig, da die elektrostatische Abstoßung sehr große Anhäufungen von Protonen und Neutronen verhindert: zwei Protonen im Abstand $r = 2 \cdot 10^{-15}$ m in einem Kern stoßen sich mit der für Elementarteilchen riesigen Kraft von $F_{el} \approx 6$ kp ab. Die Kenntnisse über die Kernkraft, die die starke Anziehung von Protonen und Neutronen im Kern und damit die Stabilität der Atomkerne bewirkt, sind noch lückenhaft. Während man durch Anhäufung elektrischer Ladungen elektrische Felder nach Belieben erzeugen kann, ist dies bei Nukleonen infolge außerordentlich kurzer Reichweite der Kernkraft nicht möglich.

Atome mit ihren Elektronenschalen konnten sich nur bei relativ niedrigen Temperaturen, wie sie auf Planeten herrschen, bilden; andererseits mußte die Temperatur aber hoch genug sein, damit die Atome miteinander reagierten. Für die Dynamik des Universums mit seinen auf sehr hohen Temperaturen befindlichen Sonnen (man schätzt, daß die Metagalaxis aus ca. 10^{11} Galaxien mit je ca. 10^{11} Sonnen besteht) ist die Kernmaterie somit viel wesentlicher als die terrestrische Atomphysik.

2. Atommodell von Rutherford-Bohr 1911/1913

Lenard (1903) schloß aus Versuchen über die Absorption schneller Elektronenstrahlen, daß die Masse eines Atoms in einem sehr kleinen Bruchteil seines Volumens enthalten ist.

Versuche über Streuung von α-Teilchen bei Durchgang durch dünne Metallfolien durch Rutherford (1911) konnten durch einfache Annahme quantitativ erklärt werden, daß die Streuung allein auf der elektrostatischen Abstoßung des positiv geladenen α-Teilchens durch die positive Ladung der Atomkerne der Folie beruht.

Planetenmodell des Atoms:

Atomkern mit positiver Ladung $Z \cdot e$ (Z ≙ Ordnungszahl im Periodensystem der Elemente) und sehr kleinem Radius R_k enthält fast die gesamte Masse des Atoms;

Elektronenhülle des Atoms enthält Z Elektronen in Abständen der Größenordnung R_a vom Kern, dabei $R_a \gg R_k$.

$R_k \approx 10^{-15}$m bis 10^{-14}m; $R_a \approx 10^{-10}$m bis 10^{-9}m

"Elektronen umkreisen Atomkern wie Planeten die Sonne".

Nach den Gesetzen der klassischen Physik müßten die den Kern umlaufenden Elektronen elektromagnetische Strahlung unter Energieverlust bis zum Sturz in den Kern aussenden: also keine Stabilität der Elektronenbahnen möglich, Existenz der Atome nicht erklärbar.

Anwendung der Grundgedanken der Quantenphysik durch Bohr (1913) auf Planetenmodell des Wasserstoffatoms: ein Elektron mit Ladung $q = -e$, Masse m, Bahngeschwindigkeit v umläuft den Kern (Proton) mit $q_k = Z \cdot e = e$ für Wasserstoff auf Kreisbahnen mit Radius r.

Berechnung der Bahnradien des umlaufenden Elektrons:

Coulomb'sche elektrostatische Anziehung $\vec{F_c} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^3} \cdot \vec{r}$

Zentrifugalkraft $\vec{F_z} = \frac{m \cdot v^2}{r^2} \cdot \vec{r}$

Aus Kräftegleichgewicht $\Sigma \vec{F} = \vec{F}_c + \vec{F}_z = 0$ ergibt sich

$$r = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 m v^2} \qquad (8)$$

Nach diesen Ergebnissen der klassischen Physik läßt sich zu jedem Bahnradius r eine solche Bahngeschwindigkeit v angeben, daß Kräftegleichgewicht herrscht. Bohr machte die Annahme, daß eine diskrete Folge von zulässigen Bahnen existiert, auf denen das Elektron ohne Ausstrahlung umfliuft; für diese Bahnen soll gelten:

$$(m \cdot v) \cdot (2\pi r) = n \cdot h \tag{9}$$

n = 1,2,3,... wird als Quantenzahl bezeichnet.
Aus (8) und (9) folgt

$$r_n = \frac{\varepsilon_0 \cdot h^2}{\pi \cdot m \cdot e^2} \cdot n^2 \tag{10}$$

Für den kleinstmöglichen Radius: n = 1 ergibt sich $r_1 = 0.53 \cdot 10^{-10}$ m , der mit den experimentell ermittelten Werten für die Größe des Wasserstoffatoms, z. B. aus gaskinetischen Versuchen, hervorragend übereinstimmt.

Berechnung der Energie des umlaufenden Elektrons in den nach (10) erlaubten Bahnen

$$W = W_{pot} + W_{kin} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} + \frac{1}{2} m v^2 = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 r} \tag{11}$$

Das Minuszeichen ergibt sich infolge der Festsetzung des Nullpunkts der Energie bei r = ∞ . Aus Gleichungen (10) und (11) folgt:

$$W_n = -\frac{m \cdot e^4}{8\varepsilon_0^2 h^2} \cdot \frac{1}{n^2} \tag{12}$$

W_1 = -13.6 eV stimmt sehr gut mit der experimentell gemessenen Ionisierungsenergie des Wasserstoffatoms überein.

Weitere Annahme von Bohr: Emission oder Absorption von Strahlung soll nur dann stattfinden, wenn das Elektron von einem energiereichen zu einem energieärmeren Zustand übergeht bzw. umgekehrt. Die bei einem solchen "Quantensprung" abgegebene bzw. aufgenommene Energie besteht in monochromatischer Strahlung (Lichtquant, Foton) mit der Frequenz ν entsprechend

$$h \cdot \nu = \Delta W = W_{n'} - W_n \,, \quad n' > n \tag{13}$$

Aus (12) und (13) folgt

$$\nu = \frac{me^4}{8\,\varepsilon_0^2\,h^3}\left(\frac{1}{n^2}-\frac{1}{n'^2}\right) = R_y\left(\frac{1}{n^2}-\frac{1}{n'^2}\right) \qquad (14)$$

berechnet: $Ry = 3.288\cdot10^{15}\ s^{-1}$; gemessen: $Ry = 3.2869\cdot10^{15}\ s^{-1}$. Damit wurde die seit 1885 bekannte, empirisch ermittelte *Balmer*-Formel für die Serie der Spektrallinien des Wasserstoffatoms mit $n = 2$ und $n' = 3, 4, 5, 6, ..,$ von denen vier Linien im sichtbaren Spektralbereich liegen, theoretisch aus dem quantenphysikalisch modifizierten Planetenmodell abgeleitet.

Klassische Grundlagen (8) und (11) mit quantenphysikalischen Zusatzbedingungen (9) und (13) führten zu einem Modell, das manche experimentellen Ergebnisse zu interpretieren gestattete, jedoch auch viele Fragen offen ließ. Vor allem lag ja für die Bohrschen Annahmen keine theoretische Begründung vor, sie erschienen als gewaltsam eingeführte Bedingungen.

Wesentliches allgemein gültiges Ergebnis: gebundene Elektronen können im Gegensatz zu freien Elektronen nur bestimmte, diskrete, also nicht beliebige Energiewerte annehmen.

3. Dualismus Welle - Teilchen

Experimente zwingen zu der Folgerung, daß elektromagnetische Strahlung und Materie sowohl Wellen- wie auch Teilcheneigenschaften, abhängig von den mit ihnen angestellten Versuchen, zeigen. Die Erkenntnis, daß beide, Welle und Teilchen, Erscheinungsformen der gleichen physikalischen Objektivität sind, ist anschaulich nicht faßbar; sie bildet die Grundlage der Wellenmechanik, die durch zahlreiche verschiedenartige Experimente glänzend bestätigt wurde und wird.

Elektromagnetische Strahlung als Welle

Beispiele: Interferenz und Beugung von sichtbarem Licht und Röntgenstrahlung
Hochfrequenztechnik

Elektromagnetische Strahlung als Teilchen

Beispiele: Lichtelektrischer Effekt (Fotoeffekt)
Compton-Prozeß
Versuch von Joffé
Versuch von Brumberg und Wawilow

Materie als Teilchen

Beispiele: Makrowelt der Mechanik
Elektronen im Elektronenstrahl der Oszillographenröhre
Atome als Bestandteile eines Gases
Bahnspur von Protonen in der Nebelkammer von Wilson

Materie als Welle

Beispiele: Beugung von Elektronenstrahlen an einer Kante und bei Durchgang durch Metallfolie
Beugung von Heliumatomstrahlen und Wasserstoffmolekülstrahlen an LiF-Kristallen
Beugung von Neutronenstrahlen bei Durchgang durch Kristalle als Mittel der Strukturanalyse

Beziehung von de Broglie (1924): $\lambda = \frac{h}{p}$ (15)

"Materiewellenlänge λ ist umgekehrt proportional zum Impuls des Teilchens $p = m \cdot v$ "

Materiewellenlänge für Elektronen nach Beschleunigung durch die

Potentialdifferenz U Volt:

$$\lambda = \frac{1.225}{U^{1/2}} \cdot \frac{1}{(1 + 0.978 \cdot 10^{-6} \cdot U)^{1/2}} \text{ nm} \qquad (16)$$

U	10	10^2	10^3	10^4	10^5	Volt
λ	≈ 0.39	≈ 0.12	0,039	0,012	≈ 0.0037	nm

Für $U \leq 10^4$ Volt kann meist mit ausreichender Genauigkeit die Näherungsformel $\lambda \approx \frac{1.225}{U^{1/2}}$ benutzt werden, die die relativistische Veränderung der Masse m (Ruhmasse des Elektrons) mit der Geschwindigkeit v

$$m_{rel} = \frac{m}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$ vernachlässigt.

Kriterium bei gegebener Problemstellung, ob Teilchenauffassung oder Wellenauffassung anzuwenden ist, lautet

"vergleiche λ mit d" , (17)

wobei d ein Maß für die Größe des zur Verfügung stehenden Raumes ist.

$\lambda \ll d$: Teilchenauffassung z. B. klassische kinetische Gastheorie, geometrische Optik, Elektronenoptik, Bewegung der Erde im Weltall

$\lambda \gg d$: Wellenauffassung z. B. Elektronengas im Metall, Beugung von Licht am engen Spalt, Ausbreitung von Mittel- und Langwellen des Hörfunks.

4. Wellenmechanisches Atommodell

Einem Teilchen oder einem atomaren System wird eine Funktion ψ zugeschrieben. Zur Behandlung von Problemen, bei denen sich der Zustand des Systems mit der Zeit ändert, z. B. bei Emission oder Absorption von Strahlung, gilt

$$\Delta\psi - \frac{8\pi^2 m}{h^2} \cdot W_{pot} \cdot \psi = -\frac{4\pi i m}{h} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial t} \qquad (4)$$

Stationäre, also zeitlich konstante Erscheinungen werden beschrieben durch

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (W - W_{pot}) \cdot \psi = 0 \qquad (18)$$

wobei $$\psi(x,y,z,t) = \psi(x,y,z) \cdot exp\left(-\frac{2\pi i W}{h} \cdot t\right).$$

Die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen zur Zeit t im Volumenelement dxdydz anzutreffen, beträgt nach Born:

$$dP = \psi\psi^* \, dx\,dy\,dz \qquad (5)$$

Normierung: Falls sich das Teilchen aufgrund der äußeren Bedingungen nur in einem gegebenen Volumen V aufhalten kann, gilt

$$\int_V dP = \int \psi\psi^* \, dx\,dy\,dz = 1 \,, \qquad (19)$$

weil das Teilchen ja irgendwo im Volumen V mit Sicherheit, P = 1, zu finden sein muß.

Anwendung auf einfaches Problem des Wasserstoffatoms:

Wegen (11) $W_{pot} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} = -\frac{b}{r}$, $b = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}$ wird aus (18)

$$\Delta\psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2}\left(W + \frac{b}{r}\right) \cdot \psi = 0 \qquad (20)$$

Koordinatensystem: Proton im Nullpunkt, Elektron als Punkt mit den Kugelkoordinaten r, ϑ, φ. Somit wird aus (20)

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin^2\vartheta} \cdot \frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial^2\psi}{\partial\vartheta^2} + \frac{1}{r^2} \cot\vartheta \frac{\partial\psi}{\partial\vartheta} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}\left(W + \frac{b}{r}\right) \cdot \psi = 0$$

Interessiert man sich im einfachsten Fall nur für kugelsymmetrische Lösung, d. h. nur für die radiale Wellenfunktion ψ (r) mit den Bedingungen $\frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} = 0$, $\frac{\partial \psi}{\partial \varphi} = 0$, so ergibt sich (statt $\partial \psi$ kann man nun $d\psi$ schreiben):

$$\frac{d^2\psi}{dr^2} + \frac{2}{r} \cdot \frac{d\psi}{dr} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \left(W + \frac{b}{r} \right) \cdot \psi = 0 \qquad (21)$$

Lösungsansatz: $\psi = C \cdot e^{-r/a}$

Durch Einsetzen in (21) erhält man

$$\frac{C}{a^2} \cdot e^{-r/a} - \frac{2 \cdot C}{r \cdot a} e^{-r/a} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} \left(W + \frac{b}{r} \right) \cdot C \cdot e^{-r/a} = 0$$

Die Summanden, die r enthalten, und jene, die r nicht enthalten, müssen sich unabhängig voneinander zu Null addieren:

$$-\frac{2}{r \cdot a} + \frac{8\pi^2 m b}{h^2 \cdot r} = 0 \qquad a = \frac{\varepsilon_0 \cdot h^2}{\pi \cdot m \cdot e^2} \qquad (22)$$

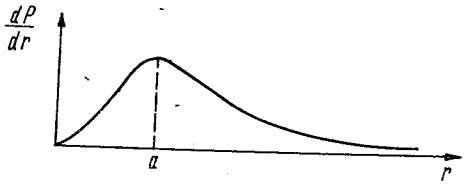
$$\frac{1}{a^2} + \frac{8\pi^2 m W}{h^2} = 0 \qquad W = -\frac{m \cdot e^4}{8 \varepsilon_0^2 \cdot h^2} \qquad (23)$$

Die Ergebnisse (22) und (23) stimmen mit (11) und (12) für n = 1, also den Grundzustand des Elektrons im Wasserstoffatom überein.

Die Wahrscheinlichkeit, das Elektron im Abstand r vom Kern, also im Volumenelement $dV = 4\pi r^2 . dr$ anzutreffen, ist nach (5)

$$dP = \psi \cdot \psi^* \cdot 4\pi r^2 dr = \psi^2 \cdot 4\pi r^2 dr$$

$$dP = C^2 e^{-2r/a} \cdot 4\pi r^2 dr = f(r) \cdot dr$$



Den wahrscheinlichsten Wert für r erhält man aus

$$\frac{df}{dr} = 0 \quad \text{zu} \quad r = a$$

Am häufigsten hält sich das Elektron im Grundzustand somit im Abstand a vom Kern auf; nach (10) ist dies gerade der Radius der Bohr'schen Elektronenbahn für $n = 1$.

Das wellenmechanische Atommodell liefert also die experimentell gefundenen Parameter des Wasserstoffatoms ohne die gewaltsamen Zusatzannahmen des Planetenmodells. Da das wellenmechanische Modell nur Wahrscheinlichkeitsaussagen macht, hat der Begriff der "Elektronenbahn" seinen Sinn verloren.

Wenn $\vec{r}$ der Vektor ist, der das Volumenelement dV mit dem Nullpunkt des Koordinatensystems, also dem Ort des punktförmig angenommenen Protons, verbindet, dann ergibt sich mit (5) für die Wahrscheinlichkeit

$$dP_r = \vec{r} \cdot \psi \cdot \psi^* \cdot dV$$

und für den Mittelwert

$$\overline{\vec{r}} = \frac{\int_{r=0}^{\infty} \vec{r} \cdot \psi \cdot \psi^* \cdot dV}{\int_{r=0}^{\infty} \psi \cdot \psi^* \, dV} = \int_{r=0}^{\infty} \vec{r} \cdot \psi \cdot \psi^* \cdot dV$$

da ja nach (19)

$$\int_{r=0}^{\infty} \psi \cdot \psi^* \, dV = 1$$

Damit folgt für das elektrische Dipolmoment im stationären Zustand

$$\overline{\vec{m}} = e \cdot \overline{\vec{r}} = e \int_{r=0}^{\infty} \vec{r} \cdot \psi \cdot \psi^* \cdot dV = const.$$

d. h. $\overline{\vec{m}}$ ist keine Funktion der Zeit. Da nach den Gesetzen der Elektrodynamik nur bei zeitlicher Änderung des Dipolmoments Energie ausgestrahlt wird, ist der betrachtete durch ψ beschriebene Zustand strahlungslos, d. h. die von Bohr gemachte Annahme der Existenz strahlungsloser Elektronenzustände, die damals mit den klassischen Vorstellungen unvereinbar waren, ergibt sich zwanglos aus der Wellenmechanik.

Die Wellenmechanik hat sich seit ihrer Ausarbeitung im gesamten Bereich der Atomphysik und beim weiteren Studium der Mikrowelt bewährt. Ihr Versagen wird erst bei Kernprozessen deutlich, bei denen eine große Zahl von Elektronen und anderen Elementarteilchen mit ihren Antiteilchen beim Stoß eines sehr energiereichen Nukleons mit einem anderen oder einem Kern entsteht. Dieses Gebiet der Elementarteilchen und ihrer Wechselwirkung bestimmt heute die vorderste Linie der experimentellen und theoretischen Physik.

In der Wellenmechanik wird der Zustand gebundener Elektronen durch Quantenzahlen beschrieben, z. B. für Atomelektronen durch n, l, m_l und m_s. Grobe anschauliche Denkhilfe: "den in der Makromechanik den Ort eines Massenpunktes beschreibenden drei Koordinaten x, y, z oder r, ϑ, φ entsprechen die drei Quantenzahlen n, l, m_l; m_s bedeutet eine Aussage über die Richtung der Eigenrotation (Spin) des Elektrons." An dieser Stelle muß jedoch nochmals nachdrücklich betont werden, daß derartige Vorstellungshilfen aus der Erfahrungswelt des Menschen nicht geeignet sind, Schlußfolgerungen abzuleiten!

Pauli-Prinzip: "in einem Atom oder anderem abgeschlossenen System der Mikrowelt werden nur solche Zustände realisiert, bei denen Elektronen nicht in allen vier Quantenzahlen übereinstimmen". Erfahrung lehrt, daß die Elemente des Periodensystems auch noch bei sehr niedrigen Temperaturen ihre unterschiedlichen Eigenschaften aufweisen. Somit ist es unmöglich, daß sämtliche Elektronen eines Atoms selbst bei $T = 0\ K$ das unterste Energieniveau gemeinsam besetzen. Wäre dies der Fall, müßten die Eigenschaften der verschiedenen Elemente bei tiefen Temperaturen einander sehr ähnlich werden. - Durch das Pauli-Prinzip wird die Schalenstruktur der Elektronenhülle von Atomen verständlich. Es ist jedoch zu beachten, daß durch unterschiedliche Quantenzahlen beschriebene Zustände durchaus gleiche Energiewerte haben können (s. Abschnitt 6).

Aufbau des Periodensystems der Elemente:

Quantenzahlen				Schale	Bezeichg. d. Zustands	Mögl. Zahl von Elektr.	Elemente
n	l	m_l	m_s				
1	0	0	$\pm$ 1/2	K	1s	2	H He
2	0	0	$\pm$ 1/2	L	2s	2	Li Be
	1	0,$\pm$1	$\pm$ 1/2		2p	6	B C N O F Ne
3	0	0	$\pm$ 1/2	M	3s	2	Na Mg
	1	0,$\pm$1	$\pm$ 1/2		3p	6	Al Si P S Cl Ar
	2	0,$\pm$1,$\pm$2	$\pm$ 1/2		3d	10	....

Schreibweise für den Aufbau der Elektronenhülle: (24)

Z = 1	Wasserstoff	H	$1s$							
2	Helium	He	$1s^2$							
3	Lithium	Li	$1s^2$	$2s$						
6	Kohlenstoff	C	$1s^2$	$2s^2$	$2p^2$					
10	Neon	Ne	$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$					
11	Natrium	Na	$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$	$3s$				
14	Silizium	Si	$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$	$3s^2$	$3p^2$			
29	Kupfer	Cu	$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$	$3s^2$	$3p^6$	$3d^{10}$	$4s$	
32	Germanium	Ge	$1s^2$	$2s^2$	$2p^6$	$3s^2$	$3p^6$	$3d^{10}$	$4s^2$	$4p^2$

5. Kollektive freier Atome - Kinetische Theorie idealer Gase

Frage: kann klassische Physik oder muß Wellenmechanik angewendet werden?

Kriterium: Vergleich von λ mit d (17)

Beispiel: Helium $p = 1$ at $T = 300$ K $m_{He} = 6.7 \cdot 10^{-27}$ kg

$n = 2.7 \cdot 10^{19}$ Atome$\cdot$cm^{-3}

$v_e \approx 1.5 \cdot 10^5$ cm$\cdot$s^{-1} (s. 28)

Mittlerer Abstand der Heliumatome voneinander

$$d \approx \frac{1}{\sqrt[3]{n}} \approx 3.3 \text{ nm}$$

de Broglie-Wellenlänge $\lambda = \frac{h}{m \cdot v_e} \approx 0.1$ nm

somit $\lambda \ll d$, klassische Physik anwendbar.

Maxwell betrachtet in seinem Denkmodell Gasatome (-moleküle) als Billardkugeln mit definiertem Radius; Häufigkeit ihrer Zusammenstöße untereinander und mit der Behälterwand sowie ihre Fluggeschwindigkeiten bestimmen das Verhalten eines Gases: chaotische Wimmelbewegung der Gasatome ("Gas" wird vom griechischen "Chaos" hergeleitet). Zwischen den Zusammenstößen fliegen die Gasatome-Billardkugeln durch den Raum, ohne die umgebende Welt wahrzunehmen, d. h. also keinerlei Wechselwirkung der Atome untereinander außer bei den elastischen Zusammenstößen.

Bei $p = 1$ at $T = 300$ K $\approx 10^{10}$ Zusammenstöße/s

$\approx 10^{-10}$ s mittlere freie Flugzeit

$\approx 10^{-5}$ cm mittlere freie Flugstrecke (Weglänge)

$p = 10^{-3}$ Torr $\approx 10^{4}$ Zusammenstöße/s

$\approx 10^{-4}$ s mittlere freie Flugzeit

≈ 10 cm mittlere freie Flugstrecke (Weglänge)

Geschwindigkeitsverteilung nach Maxwell

Wahrscheinlichkeit dP_x dafür, daß die Geschwindigkeitskomponente in x-Richtung einen Wert zwischen v_x und $(v_x + dv_x)$ hat:

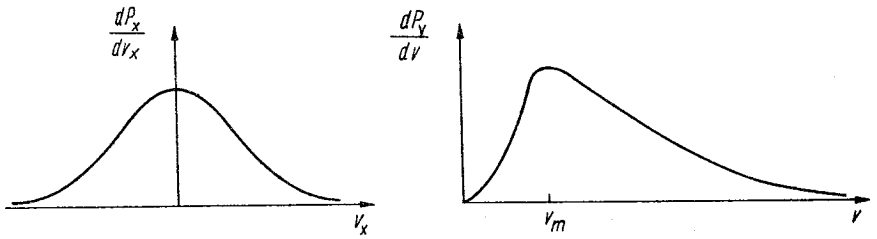
$$dP_x = \frac{dN_x}{N} = \frac{1}{\pi^{1/2} \cdot v_m} \cdot e^{-\left(v_x/v_m\right)^2} \cdot dv_x \qquad (25)$$

Wahrscheinlichkeit $dP_{x,y,z}$ dafür, daß gleichzeitig die Komponenten der Geschwindigkeit v Werte zwischen v_x und $(v_x + dv_x)$, v_y und $(v_y + dv_y)$ und v_z und $(v_z + dv_z)$ haben:

$$dP_{x,y,z} = \frac{dN_{x,y,z}}{N} = \frac{1}{\pi^{3/2} \cdot v_m^3} \cdot e^{-\frac{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2}{v_m^2}} \cdot dv_x \cdot dv_y \cdot dv_z \qquad (26)$$

Wahrscheinlichkeit dP_v dafür, daß der Betrag der Geschwindigkeit v einen Wert zwischen v und (v + dv) hat:

$$dP_v = \frac{dN_v}{N} = \frac{4}{\pi^{1/2} \cdot v_m^3} \cdot v^2 \cdot e^{-\left(v/v_m\right)^2} \cdot dv \qquad (27)$$



Wahrscheinlichste Geschwindigkeit $v_m = \sqrt{\frac{2kT}{m}}$ (28)

bei T = 300 K für H-Atome v_m = 2260 m·s^{-1}

H_2-Moleküle 1610

N_2-Moleküle 430

Mittelwert der Geschwindigkeit $\overline{v} = \int_0^\infty v \cdot dP_v = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} = 1.128\, v_m$

Effektive Geschwindigkeit $v_e = \sqrt{\overline{v^2}} = \sqrt{\int_0^\infty v^2 \cdot dP_v} = \sqrt{\frac{3kT}{m}} = 1.223\, v_m$

Nach (27) ergibt sich für $v = 10\, v_m$: $dP_v \approx e^{-100} \cdot dv \approx 10^{-43} \cdot dv$!

Formel (27) sagt aus, daß von einer gegebenen, beliebig großen Gesamtzahl N von Atomen innerhalb eines gegebenen Volumens im Mittel der Bruchteil $dP_v = \frac{dN_v}{N}$ bei der Temperatur T eine Geschwindigkeit im Bereich von v bis (v + dv) hat. Die Max-

well'sche Geschwindigkeitsverteilung macht also eine Aussage über den relativen Anteil solcher Atome, ohne ihrer absoluten Zahl Beschränkungen aufzuerlegen.

Energieverteilung nach Maxwell: mit $W_{kin} = \frac{1}{2} mv^2$ ergibt sich

$$dP_{W_{kin}} = \frac{dN_{W_{kin}}}{N} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{W_{kin}}{kT}\right)^{1/2} \cdot e^{-W_{kin}/kT} \cdot d\left(\frac{W_{kin}}{kT}\right) \qquad (29)$$

Zahl der auf die Flächeneinheit der Wand pro Zeiteinheit auftreffenden Atome ist gleich der Zahl der Atome eines Quaders der Länge v_x. Alle weiter entfernten Atome können die Wand in der Zeiteinheit nicht mehr erreichen:

$$z = \int_{v_x=0}^{\infty} n \cdot v_x \cdot dP_{v_x} = \frac{n \cdot \bar{v}}{4} \qquad (30)$$

Gasgesetze

Trifft ein Atom der Masse m mit der Geschwindigkeit v_x senkrecht auf die glatte Wand auf, so beträgt seine Impulsänderung nach der Reflexion von der Wand 2 m v_x. Entsprechend (30) ist die Zahl der pro Flächen- und Zeiteinheit die Wand treffenden Atome $dz = n \cdot v_x \cdot dP_{v_x}$, die infolge des Impulsaustausches die Kraft pro Flächeneinheit, also den Druck auf die Wand $dp = (2m \cdot v_x) \cdot dz = 2nm v_x^2 \cdot dP_{v_x}$ ausüben:

$$p = 2nm \int_{v_x=0}^{\infty} v_x^2 \cdot dP_{v_x} = \frac{1}{2} nm v_m^2 = n \cdot kT$$

Da $n \cdot V = N$ folgt $p \cdot V = N \cdot k \cdot T \qquad (31)$

Mit $V = V_m$ (= Molvolumen) und $N = N_L = 6.025 \cdot 10^{23}$ Atome$\cdot$mol^{-1} ergibt sich

$$p \cdot V_m = N_L \cdot k \cdot T = R \cdot T \qquad (32)$$

Diffusion: infolge der chaotischen Wimmelbewegung tritt ein Nettofluß von Atomen von Gebieten höherer Konzentration zu solchen kleinerer Konzentration auf. Wichtig: dieser Fluß entsteht nicht

infolge der Einwirkung von Kräften, sondern allein infolge der Kinetik des Gases.

Fluß $f = -D \cdot \frac{dn}{dx}$ 1. Ficksches Gesetz (33)

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \cdot \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}$$ 2. Ficksches Gesetz (34)

D≡Diffusionskonstante

Gleichverteilung der Energie: zerlegt man die Geschwindigkeit v_e eines Atoms in ihre drei Komponenten, so gilt $v_e^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$
Da die Geschwindigkeitsverteilung isotrop, also keine Richtung vor den anderen bevorzugt ist, muß gelten

$$\overline{v_x^2} = \overline{v_y^2} = \overline{v_z^2} = \frac{1}{3} v_e^2$$

Die kinetische Energie des Atoms setzt sich also aus 3 gleichen Anteilen zusammen:

$$W_{kin} = \frac{1}{2} m v_e^2 = 3\left(\frac{1}{6} m v_e^2\right) = \frac{3}{2} kT \qquad (s.28)$$

Man sagt: ein freies Atom hat 3 Freiheitsgrade der translatorischen Bewegung, die kinetische Energie pro Freiheitsgrad beträgt 1/2 kT. (35)

Diese Aussage gilt allgemein für jeden Freiheitsgrad beliebiger Bewegungsarten: (36)

Atom, das nur auf einer Geraden beweglich ist	1 Freiheitsgrad
Linearer Oszillator (Kugel zwischen zwei achsialen Federn)	2
Translation eines Atoms in allen drei Koordinatenrichtungen	3
Rotation eines Moleküls um 3 Achsen	3
Translation und Rotation eines zweiatomigen Moleküls	5
Atome im festen Körper	6

Spezifische Wärmen der idealen Gase

1-atomige Gase $W_i = W_{kin} = 3\left(\frac{kT}{2}\right) \cdot N_L \quad cal \cdot mol^{-1}$

$$C_V = \frac{dW_i}{dT} = \frac{3}{2} N_L \cdot k = \frac{3}{2} R \approx 3\ cal \cdot mol^{-1} \cdot grd^{-1}$$

gemessene Werte für Argon: 2.977 Helium: 2.9 Quecksilber: 2.99 $cal \cdot mol^{-1} grd^{-1}$

2-atomige Gase $W_i = 5\left(\frac{kT}{2}\right)\cdot N_L \ cal\cdot mol^{-1}$

$$C_v = \frac{5}{2} R \approx 5\, cal\cdot mol^{-1}\cdot grd^{-1}$$

gemessene Werte für Sauerstoff: 4.928 Stickstoff: 4.851 cal·mol^{-1}·grd^{-1}

Die bei realen Gasen bei tieferen Temperaturen auftretenden Abweichungen von dieser klassischen Betrachtung und ihren Ergebnissen wurden durch die Wellenmechanik in ausgezeichneter Übereinstimmung mit den experimentellen Resultaten gedeutet.

Spezifische Wärme fester Körper

$W_i = 6\left(\frac{kT}{2}\right)\cdot N_L$; $\quad C_v = 3R \approx 6\ cal\cdot mol^{-1} grd^{-1}$

Dies ist die seit langem bekannte Regel von Dulong-Petit (37) Sie ist eine Näherung, die nur bei um so höheren Temperaturen gut erfüllt ist, je kleiner das Atomgewicht des betrachteten Elements ist. Für Diamant ergibt das Experiment bei Zimmertemperatur einen Wert von nur $C_v \approx 1.5$ cal·mol^{-1}grd^{-1}. Bei Annäherung an den absoluten Nullpunkt nähert sich die spezifische Wärme der festen Körper dem Wert Null; diese Effekte wurden ebenfalls durch die Quantenphysik geklärt. Die gleiche Aussage trifft auf die nach klassischen Gesichtspunkten unverständliche Tatsache zu, daß das Elektronengas in Metallen (s. Abschnitt 6) praktisch keinen Beitrag zur spezifischen Wärme leistet.

Wirkungsquerschnitt

Entsprechend dem Modell der starren Billardkugeln für Gasatome erfolgt ein Zusammenstoß von zwei Atomen mit den Radien R_1 und R_2 z. B. in Gasmischungen, wenn sich ihre Mittelpunkte bis auf den Abstand $(R_1 + R_2)$ genähert haben. Der wirksame Stoßquerschnitt, oder allgemein, der Wirkungsquerschnitt beträgt $\sigma = \pi (R_1 + R_2)^2$
Da Atome aber keine Billardkugeln, sondern aus elektrischen Ladungsträgern kompliziert aufgebaute Gebilde sind, ist die Angabe eines Radius bzw. eines Wirkungsquerschnitts problematisch. Jedoch hat sich der Begriff "Wirkungsquerschnitt" zur Beschreibung von Wechselwirkungsprozessen allgemein bewährt.

Absorptionsgesetz: werden in ein Billardkugelngas der Konzentration n, dessen Atome den Wirkungsquerschnitt 6 haben, N_0 punktförmige Teilchen gleichzeitig hineingeschossen, so nimmt deren Anzahl mit dem Abstand x von der Oberfläche des Gases ab, da mehr und mehr von ihnen durch Zusammenstöße mit den Atomen aus dem eingeschossenen Teilchenstrom hinausgestreut werden. Nach der Tiefe x beträgt ihre Anzahl nur noch

$$N = N_0 \cdot e^{-n6 \cdot x} = N_0 \cdot e^{-\mu x} \tag{38}$$

Die Eindringtiefe der punktförmigen Teilchen ist verschieden; für ihre mittlere Eindringtiefe, die mittlere freie Weglänge λ_s ergibt sich

$$\lambda_s = \frac{1}{\mu} = \frac{1}{n6} \tag{39}$$

Bei Berücksichtigung der thermischen chaotischen Wimmelbewegung der Gasatome gilt:

für $R_1 \neq R_2$ $\quad \lambda_s = \dfrac{1}{\sqrt{2} \cdot n \cdot \pi \cdot (R_1 + R_2)^2}$

$R_1 = R_2 = R$ $\quad \lambda_s = \dfrac{1}{4\sqrt{2} \cdot n \cdot \pi \cdot R^2}$

$R_1 \ll R_2$ $\quad \lambda_s = \dfrac{1}{\sqrt{2}\, n \cdot \pi \cdot R_2^2}$

$R_1 \ll R_2$ und $v_1 \gg v_2$ (Elektronen gegen Atome)

$$\lambda_s = \frac{1}{n \cdot \pi \cdot R_2^2}$$

Aus $\lambda_s = \dfrac{1}{n \cdot 6}$ folgt $\quad \lambda_s \cdot p = \dfrac{kT}{6} = const.\ für\ T = const.$

Für Luft bei T = 300 K $\quad \lambda_s p = 4.56 \cdot 10^{-5}\ m \cdot Torr$

Zwischen den realen Atomen wirken infolge ihres "elektrischen" Aufbaus anziehende Kräfte. Sie veranlassen einen "weichen" Zusammenstoß, d.h. schon in größerer Entfernung als $(R_1 + R_2)$ voneinander ist eine Wechselwirkung vorhanden. Diesem Effekt trägt die Sutherland-Korrektur K_s Rechnung

$$\lambda_s = \frac{1}{4\sqrt{2} \cdot n \cdot \pi \cdot R^2 \left(1 + \frac{K_s}{T}\right)} = \frac{\lambda_s\,(T = \infty)}{1 + \frac{K_s}{T}} \tag{40}$$

Werte der Korrektur K_s: $50\ K < K_s < 300K$, z. B. für Luft $K_s = 115\ K$

Verteilungsgesetz der freien Weglängen

$$dP = \frac{1}{\lambda_s} \cdot e^{-x/\lambda_s} \cdot dx \tag{41}$$

dP ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß die Weglänge einen Wert zwischen x und (x + dx) hat, wenn die mittlere freie Weglänge den Wert λ_s hat.

Wahrscheinlichkeit dafür, daß die freie Weglänge einen Wert zwischen x_1 und x_2 hat:

$$P_{x_1,x_2} = \int_{x_1}^{x_2} dP = e^{-x_1/\lambda_s} - e^{-x_2/\lambda_s} \tag{42}$$

Wahrscheinlichkeit dafür, daß die freie Weglänge größer als x_1 ist, d. h. $x_2 = \infty$:

$$P_{>x_1} = e^{-x_1/\lambda_s} \tag{43}$$

$x_1 = 0$	λ_s	$4\lambda_s$	$5\lambda_s$	$10\lambda_s$
$P_{>x_1} = 1$	0.368	0.018	0.0067	0.000045

Maxwell-Boltzmann-Verteilung gibt für ein gegebenes System die Wahrscheinlichkeit der Besetzung der Energiezustände zwischen W und (W + dW) an

$$dP = A \cdot e^{-\frac{W}{kT}} \cdot dW \tag{44}$$

A ist eine Funktion der Temperatur und anderer Eigenschaften des betrachteten Systems, somit eine dafür charakteristische Größe. Für das Verhältnis der Besetzungswahrscheinlichkeiten, somit der Besetzungszahlen zweier verschiedener Zustände: W_1 bis $(W_1 + dW)$ und W_2 bis $(W_2 + dW)$ folgt:

$$\frac{dP_1}{dP_2} = e^{-\frac{W_1 - W_2}{kT}} \tag{45}$$

Beispiel: Luftdichte als Funktion der Höhe h über Erdboden für $T = \text{const.}$ und $h \ll$ Erdradius. Die Energiezustände in verschiedener Höhe unterscheiden sich durch die potentielle Energie der Luftmoleküle der Masse m:

$$W_{pot} = m \cdot g \cdot h$$

$$W_1 = W_h = W_{pot_h} = m \cdot g \cdot h$$

$$W_2 = W_o = W_{pot_o} = 0 \qquad \text{für} \quad h = 0$$

$$\frac{dP_1}{dP_2} = \frac{N_h}{N_o} = e^{-\frac{m\,g\,h}{kT}} \qquad \text{barometrische Höhenformel}$$

6. Kollektive von Elektronen in Metallen

Viele Eigenschaften elektrisch isolierender Kristalle kann man verstehen, wenn man sie als Gitter von Atomen oder Ionen ansieht; um die in diesen Atomen/Ionen enthaltenen Elektronen braucht man sich nicht zu kümmern. Bei Metallen besteht andere Sachlage: ihre typische Eigenschaft ist die elektrische Leitfähigkeit. Aber ein aus Atomen/Ionen bestehendes Gitter, von denen sich keine Elektronen entfernen können, ist ein Isolator; dieses Modell daher für Metalle ungeeignet. - Zu den Grundvorstellungen der Elektrizitätslehre gehört es, daß man in den Metallen praktisch frei bewegliche Ladungsträger annimmt: das einfachste Metallmodell ist ein "Medium", in dem sich Elektronen ähnlich bewegen wie die Atome eines Gases.

Im Metall bilden die Ionen der Metallatome ein Gitter, das durch das Elektronengas zusammengehalten wird. Jedes praktisch freie, auch quasifrei genanntes Elektron gehört dabei nicht zu einem bestimmten Ion, sondern bewegt sich zwischen der Gesamtheit der Ionen. Maßgebend für das Verhalten eines Elektrons ist das Kraftfeld, in dem es sich aufhält; dies wird durch das Potential des elektrischen Feldes, erzeugt durch die Ionen und die übrigen Elektronen, beschrieben. Ohne Einzelheiten zu untersuchen, kann man einsehen, daß dieses Potential eine periodische Ortsfunktion entsprechend dem Gitteraufbau ist und am Ort der Ionen jeweils sehr hohe positive Werte annimmt. Zwischen den Ionen schwankt es relativ wenig und in erster Näherung kann man es als konstant ansehen. Danach ergibt sich das weiter vereinfachte Modell: das Innere des Metalls ist ein Gebiet konstanten Potentials; die durch die positiven Ionen gebildete positive Ladung soll strukturlos und ausreichend gleichmäßig über das Metallvolumen verteilt sein, um elektrische Neutralität mit dem Elektronengas zu ergeben. Durch die positiven Ionen soll die Elektronenbewegung praktisch nicht behindert werden, eine Wechselwirkung zwischen den Elektronen wird vernachlässigt.

Frage: kann klassische Physik oder muß Wellenmechanik angewendet werden?

Kriterium: Vergleich von λ mit d (17)

Beispiel: 1 cm^3 Kupfer enthält $\frac{\varrho \cdot N_L}{A} = \frac{8.9 \cdot 6 \cdot 10^{23}}{63.6} = 8.5 \cdot 10^{22}$ *Cu-Atome*

Annahme, daß jedes Cu-Atom ein Valenzelektron zum Elektronengas beisteuert, bedeutet, daß die Konzentration der quasifreien Elektronen beträgt:

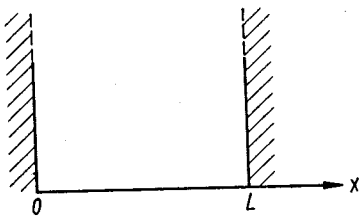
$n = 8.5 \cdot 10^{22}\ cm^{-3}$, daraus $d = \frac{1}{\sqrt[3]{n}} \approx 0.23$ nm

$v_e \approx 1.17 \cdot 10^7\ cm \cdot s^{-1}$ bei $T = 300$ K

de Broglie-Wellenlänge $\lambda = \frac{h}{m \cdot v_e} \approx 6.2$ nm

somit $\lambda \gg d$, also Wellenmechanik erforderlich. (46)

Teilchen in einem Potentialtopf (also in einem begrenzten Raum)



Vereinfachung: eindimensionaler Potentialtopf. Teilchen der Masse m bewegt sich nur in einer Dimension x im Potentialtopf der Länge L.

$W_{pot} = 0$ für $0 \leq x \leq L$

$W_{pot} = \infty$ für $x < 0$ und $x > L$

Schrödingergleichung (18): $\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(W-0) \cdot \psi = 0$ (47)

Lösungsansatz : $\psi = A \cdot \sin(kx + b)$

Randbedingungen: $\psi = 0$ für $x \leq 0$ und $x \geq L$, da das Teilchen außerhalb des Topfes infolge der unendlich "hohen" Wände nicht vorhanden sein kann

Lösung : $\psi = A \cdot \sin \frac{n\pi}{L} \cdot x$

Berechnung von A nach (19): $\int_{x=0}^{L} \psi \cdot \psi^* \cdot dx = \int_0^L \psi^2 dx = 1$

ergibt $\psi = \sqrt{\frac{2}{L}} \cdot \sin \frac{n\pi}{L} x$ (48)

Einsetzen von (48) in (47) ergibt für die Gesamtenergie W des Teilchens, die wegen $W_{pot} = 0$ ausschließlich kinetische Energie

W_{kin} ist,

$$W - W_{kin} = \frac{n^2 h^2}{8mL^2} \tag{49}$$

Gleichung (49) bedeutet, daß das im eindimensionalen Raum gebundene, d.h. auf diesen Raum beschränkte Teilchen nicht beliebige, sondern nur diskrete, bestimmte Energiewerte entsprechend der Quantenzahl n = 1,2,3,4... annehmen kann.

$$\Delta W_{kin} = (n'^2 - n^2)\frac{h^2}{8mL^2} = \frac{3h^2}{8mL^2} \qquad \text{für } n' = 2,\ n = 1$$

Für Elektronen

$$\Delta W_{kin} = \frac{1.15 \cdot 10^{-14}}{L^2}\ eV \quad \text{für } n' = 2,\ n = 1 \tag{50}$$

L = 10^{-7} cm	(Abmessungen von Atomen)	ΔW_{kin} = 1.15 eV
= 1 cm	(makroskopischer Körper)	= $1.15 \cdot 10^{-14}$ eV
= ∞	(freies Elektron)	= 0

Verallgemeinerung für Bewegung in dreidimensionalem Potentialtopf mit den Dimensionen L_x, L_y, L_z:

$$\psi = \sqrt{\frac{8}{L_x \cdot L_y \cdot L_z}}\ \sin\left(\frac{n_x \pi}{L_x} x\right) \cdot \sin\left(\frac{n_y \pi}{L_y} y\right) \cdot \sin\left(\frac{n_z \pi}{L_z} \cdot z\right)$$

$$W_{kin} = \frac{h^2}{8m}\left[\left(\frac{n_x}{L_x}\right)^2 + \left(\frac{n_y}{L_y}\right)^2 + \left(\frac{n_z}{L_z}\right)^2\right]$$

Für jede Dimension x, y, z des Problems ergibt sich eine Quantenzahl n_x bzw. n_y bzw. n_z. Bei gegebenen Werten L_x, L_y, L_z kann der gleiche Energiewert bei verschiedenen Kombinationen von n_x, n_y, n_z erreicht werden; z. B. ergibt sich bei $L_x = L_y = L_z = L$ für

$W_{kin} = \frac{h^2}{8mL^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)$ der gleiche Wert bei den Kombinationen der Quantenzahlen (n_x, n_y, n_z) = (1,2,3), (1,3,2), (2,1,3), (2,3,1), (3,1,2) und (3,2,1); somit haben 6 verschiedene Quantenzustände die gleiche Energie. Bezieht man den Spin des Elektrons

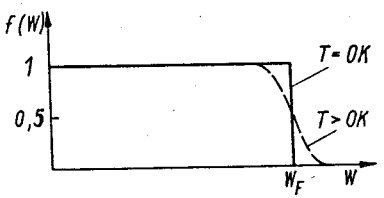
in dieser Betrachtung ein, so ist dieser Quantenzustand nicht 6-fach, sondern 12-fach entartet.

Wie aus (50) für $L = 1$ cm hervorgeht, ist der energetische Abstand in einem großen Raum, z. B. einem Stück Kupfer, zwischen den zulässigen Quantenzuständen außerordentlich gering, die Quantenzustände bilden ein Band. Für ihre Anzahl pro Volumeneinheit $\frac{dz}{V}$ im Energiebereich zwischen W und (W + dW) ergibt sich die Zustandsdichte

$$\frac{dz}{V} = 4\pi \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \cdot W^{1/2} \cdot dW \qquad (51)$$

Die Wahrscheinlichkeit, ob ein entsprechend (51) möglicher Zustand tatsächlich von einem Elektron eingenommen wird, bestimmt unter Berücksichtigung des Pauli-Prinzips (s. Abschnitt 2) die Fermi-Dirac-Verteilung

$$f(W) \quad \frac{1}{\exp\frac{W - W_F}{kT} + 1} \qquad (52)$$



Bei $T = 0$ K sind sämtliche möglichen, zulässigen Zustände bis $W = W_F$ besetzt:

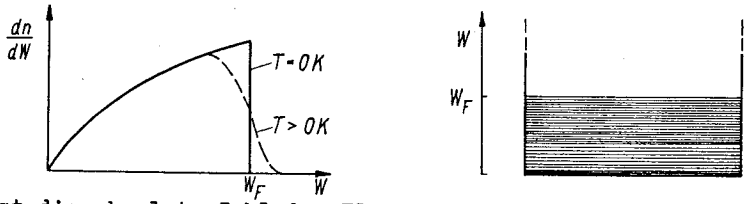
$f(W) = 1$ für $W < W_F$ $\quad f(W) = 0$ für $W > W_F$.

Während also bei einem idealen Gas nach Maxwell wegen $W_{kin} = \frac{1}{2} m v_e^2 = \frac{3}{2} kT$ mit sinkender Temperatur die kinetische Energie jedes Gasatoms gegen Null geht, bleibt bei einem "Fermigas", z. B. dem Elektronengas in Kupfer, die Energie der Elektronen auch noch am absoluten Nullpunkt endlich: Nullpunktsenergie, Entartung. Bei höheren Temperaturen $T > 0$ K werden auch einige Zustände mit hö-

herer Energie $W > W_F$ von Elektronen besetzt, d. h. Elektronen in steigender Zahl haben bei steigender Temperatur höhere Energien (s. den gestrichelt gezeichneten Schwanz der Fermi-Dirac-Verteilung).

Aus (51) und (52) ergibt sich die Energieverteilung der Elektronen

$$dn = \frac{dz}{V} f(W) = 4\pi \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \cdot \frac{W^{1/2} \cdot dW}{\exp\left(\frac{W - W_F}{kT}\right) + 1} \tag{53}$$



dn ist die absolute Zahl der Elektronen pro Volumeneinheit mit kinetischen Energien zwischen W und (W + dW) bei der Temperatur T. W_F ist ein das Metall kennzeichnender Parameter (56). Dagegen gibt die Energieverteilung für Gasatome nach Maxwell (29) den relativen Anteil an Gasatomen mit kinetischen Energien zwischen W und (W + dW) an. Dieser entscheidende Unterschied wird durch das in der Mikrowelt geltende Pauli-Prinzip hervorgerufen.
Sind n Elektronen pro Volumeneinheit auf die zulässigen Zustände zu verteilen, so läßt sich aus

$$n = \int_{W=0}^{\infty} \frac{dz}{V} f(W) = 4\pi \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \int_{0}^{\infty} \frac{W^{1/2} \cdot dW}{\exp\frac{W - W_F}{kT} + 1} \tag{54}$$

der Parameter der Fermi-Dirac-Verteilung W_F, auch als Fermienergie oder Ferminiveau bezeichnet, berechnen:

$$W_F = \frac{h^2}{2m}\left(\frac{3n}{8\pi}\right)^{3/2} - \frac{\pi^2}{12} \cdot \frac{2mk^2T^2}{h^2}\left(\frac{8\pi}{3n}\right)^{2/3} + \tag{55}$$

$$W_F\,(T=0K) = \frac{h^2}{2m}\left(\frac{3n}{8\pi}\right)^{2/3} \qquad (56)$$

Beispiele: Kupfer $n = 8{,}5\cdot10^{22}$ Elektronen$\cdot$cm^{-3}
$W_F(T=0\ K) = 7$ eV
Die maximale kinetische Energie, die nach diesem Modell Elektronen bei $T = 0$ K im Kupfer haben, beträgt somit $W_{kin} = 7$ eV !

Kalium	$W_F = 1.9$ eV
Natrium	2.5
Lithium	3.7
Zink	11.0
Aluminium	11.8

Temperaturabhängigkeit von W_F aus (55) und (56):

$$W_F = W_F\,(T=0K)\left[1 - \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{kT}{W_F\,(T=0K)}\right) + \cdots\right]$$

Für $T = 1000$ K und $W_F(T=0\ K) = 7$ eV folgt

$$W_F\,(T=1000K) = W_F\,(T=0K)\left[1 - 1.2\cdot10^{-4}\right] \approx W_F\,(T=0K)$$

Bei für feste Körper realisierbaren Temperaturen kann somit die Temperaturabhängigkeit von W_F fast immer vernachlässigt wer- (57)
den.

Gesamtenergie des Elektronengases

$$W_{ges} = \int_{W=0}^{\infty} W\cdot dn \approx \frac{4\pi h^2}{5m}\left(\frac{3n}{8\pi}\right)^{5/3} = \frac{3}{5}\,n\cdot W_F \qquad (58)$$

In erster Näherung ist die Gesamtmenge des Elektronengases unabhängig von der Temperatur, in gleicher Näherung verschwindet also auch der Beitrag der Elektronen zur spezifischen Wärme (37).

Entartungstemperatur: die Entartung des Elektronengases muß verschwinden, wenn $\lambda \approx d$ wird.

Mit $v_e = \sqrt{\frac{3kT}{m}}$ folgt $T_e \approx \frac{h^2}{3mk} \cdot n^{2/3}$

Genauere Betrachtung: die Entartung verschwindet, wenn die mittlere kinetische Energie* $\overline{W_{kin}} = kT$ von der Größenordnung ihrer maximalen Nullpunktsenergie W_F wird, weil bei höherer Temperatur die Energieverteilung der Elektronen nicht mehr in erster Linie durch Quantengesetze der Wellenmechanik und das Pauliprinzip, sondern durch die Temperatur bestimmt wird:

Aus $W_F = kT_e$ folgt $T_e = \frac{h^2}{2mk} \left(\frac{3n}{8\pi}\right)^{2/3}$ (59)

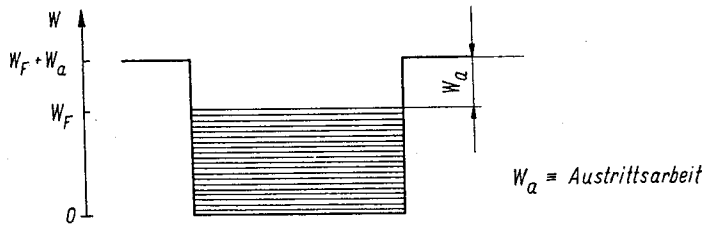
Beispiel: Kupfer $W_F = 7$ eV $T_e \approx 84\,000$ K
d. h. das Elektronengas ist bei allen praktisch realisierbaren Temperaturen entartet.

Zusammenfassung: das Modell der quasifreien Elektronen in einem begrenzten Raum erklärt manche Eigenschaften der Metalle sehr gut. Dies ist überraschend, da hierbei die Streuung der Elektronen an den Gitterionen vernachlässigt wird. Das einzige berücksichtigte Potential ist das die Elektronen im Metall festhaltende Potential. Dieses Modell ergibt ein Quasikontinuum von Energiewerten (Energieband) bis zur Fermienergie W_F, die verständlicherweise infolge des Pauli-Prinzips von der Zahl der Elektronen abhängt. Man kann die Theorie der quasifreien Elektronen im Potentialtopf mit konstantem Potential als Theorie beschreiben, die ein Modell mit einem Energieband mit Elektronenenergien $0 \leq W_{kin} \leq W_F$ vorhersagt.

* der Elektronen

7. Elektronenemission

Nach (56) sind die zulässigen, erlaubten Zustände im Potentialtopf mit unendlich hohen Wänden als einfachstes Modell eines Metalls bis etwa zum Energiewert W_F mit Elektronen besetzt. Schon im 19. Jahrhundert wurde beobachtet, daß man durch Zufuhr eines endlichen Energiebetrags aus dem Metall Elektronen auslösen kann: die Erscheinungen der Elektronenemission waren entdeckt. Sie erforderten eine Korrektur des verwendeten Modells: der Potentialtopf hat nur endlich hohe Wände!



(60)

Fotoeffekt

Ein Elektron mit der kinetischen Energie $0 \leq W_i \leq W_F$ absorbiert bei Belichtung des Metalls ein eingedrungenes Lichtquant mit der Energie $W = h\nu$. Zum Austritt aus dem Potentialtopf, d. h. zur Überwindung seiner Wände ist nach (60) mindestens die Energie $W_a + W_F$ erforderlich. Für die kinetische Energie des emittierten Elektrons ergibt sich also

$$W'_{kin} = (W_i + h\nu) - (W_F + W_a)$$

Da $W_{i_{max}} = W_F$, folgt $W'_{kin_{max}} = h\nu - W_a$ Einstein (61)

Fotoeffekt tritt nur auf, wenn $h\nu \geq W_a$. Da für viele Metalle $W_a \geq 3$ eV, bewirkt nur ultraviolettes, nicht jedoch sichtbares Licht eine Fotoemission. - Die Zahl der pro Zeiteinheit ausgelösten Fotoelektronen, d. h. also der Fotostrom, ist dem auffallenden Lichtstrom proportional.

Technisch angewendete Fotokatoden

$$[Ag] - Cs_2O\,,\ Ag\,,\ Cs - Cs$$

Maximum der Lichtempfindlichkeit liegt bei ca. 700-800 nm, also im ultraroten Spektralbereich, jedoch auch im Sichtbaren gute, technisch verwertbare Empfindlichkeit. Die Ultrarotempfindlichkeit wird nach (61) durch eine kleine Austrittsarbeit $W_a \approx 0.75 \div 0.95$ eV bewirkt. Daher tritt aber auch bereits bei Zimmertemperatur eine thermische Elektronenemission (62) auf, d. h. es fließt auch ohne Belichtung der Fotokatode ein "Dunkelstrom" von ca. $5 \cdot 10^{-14}$ A·cm^{-2}.
Verwendung z. B. in Ultrarot-Sichtgeräten.

$[SbCs_3]$ -Cs

Maximum der Lichtempfindlichkeit liegt bei ca. 400 nm, diese Fotokatode ist daher besonders blau-, d. h. tageslichtempfindlich. Mit $W_a \approx 1.3$ eV beträgt die Dunkelstromdichte ca. 10^{-16} A·cm^{-2}.
Verwendung z. B. in Fernseh-Aufnahmeröhren.

Beide Typen von Fotokatoden sind kompliziert zusammengesetzte Halbleiter, die in einem Formierprozeß bei Temperaturen von 150-200°C gebildet werden. Die in einer Serienfertigung erreichten Werte für Empfindlichkeit und Dunkelstromdichte weisen daher relativ starke Schwankungen auf. Auf der Grundlage der beiden genannten Grundtypen werden weitere komplexe Fotokatoden-Halbleiter für technische Anwendungen entwickelt.

Thermische Elektronenemission

Entsprechend (53) hat die Energieverteilung im Metall bei $T > 0$ K einen Schwanz, der über $W = W_F$ hinausgeht. Ist die Temperatur ausreichend hoch, so wird die Zahl der Elektronen mit $W_{kin} \geq W_F + W_a$ merklich: thermische Elektronenemission. Werden sämtliche ausgetretenen Elektronen durch ein ausreichendes, außen an die emittierende Katode angelegtes Feld zu einer Anode (Diode) abgesaugt, so fließt der Sättigungsstrom mit der Stromdichte (nach Richardson):

$$G = \frac{4\pi m e^2 k^2}{h^3} \cdot T^2 \cdot e^{-\frac{W_a}{kT}} = A \cdot T^2 \cdot e^{-\frac{W_a}{kT}} \qquad (62)$$

Bestimmung der Austrittsarbeit W_a und A durch Messung von G bei

verschiedenen Temperaturen:

$$\ln \frac{G}{T^2} = \ln A - \frac{W_a}{kT} \quad ; \qquad \ln \frac{G}{T^2} = f\left(\frac{1}{T}\right)$$

Technisch angewendete Glühkatoden

Wolfram	$T \approx 2500$ K	$W_a \approx 4.5$ eV
Thoriertes Wolfram	≈ 1950	≈ 3.2
Erdalkalioxide	≈ 1100	≈ 1.4

Bei den genannten Arbeitstemperaturen ist die Sättigungsstromdichte bei allen Katodenarten von der Größenordnung 500 $mA \cdot cm^{-2}$.

Elektronengas im Vakuum

Außerhalb der Katode stellt sich - wenn kein elektrisches Feld anliegt - eine Dichte des Elektronengases ein, die durch das Gleichgewicht: emittierte Elektronenstromdichte (62) = zurückfallende Elektronenstromdichte (30) bestimmt wird.

Aus $G = \frac{1}{4} n \cdot \bar{v} \cdot e$

mit $T = 2700\,K$, $G = 1\,A \cdot cm^{-2}$, $\bar{v} = 3.5 \cdot 10^7\,cm \cdot s^{-1}$

folgt $d \approx 1.1 \cdot 10^{-4}\,cm \quad \lambda \approx 2.1 \cdot 10^{-7}\,cm$

somit $d \gg \lambda$

d. h. das Elektronengas im Vakuum, z. B. in einer Elektronen-Verstärkerröhre, ist weit vom Zustand der Entartung entfernt und kann daher als Maxwellgas, die einzelnen Elektronen als Teilchen behandelt werden.

Schottky-Effekt-Einfluß der Bildkraft auf Elektronenemission

Beim Austritt kann man den Weg der Elektronen grob in zwei Teile zerlegen:

1. Elektron befindet sich zunächst unter Kraftwirkung der nächstgelegenen Ionen und Atome. An der Oberfläche sind Ionen polarisiert, da Gitterkräfte nur nach innen wirken.
2. bei größerem Abstand von der Oberfläche nach dem Austritt kann man die Kraftwirkungen summarisch durch die Bildkraft darstellen (Schottky).

Wird ein elektrisches Feld E, das zur Oberfläche gerichtet ist, angelegt, so hat das resultierende Potential außerhalb der Katode im Abstand r die Größe

$$V = \frac{e}{16\pi\varepsilon_0 r} + E \cdot r \qquad (64)$$

daraus ergibt sich eine Verringerung der Austrittsarbeit

$$\Delta W_a = -\sqrt{\frac{e^3 E}{4\pi\varepsilon_0}}$$

Bei $E = 10^8\ V \cdot m^{-1}$ ist $\Delta W_a \approx -0{,}4$ eV !

Die Erhöhung der Anodenspannung einer Diode über den zur Erreichung der Sättigung des Elektronenstromes notwendigen Wert hinaus führt somit zu einem weiteren Anstieg des gemessenen Stroms.

Feldelektronenemission

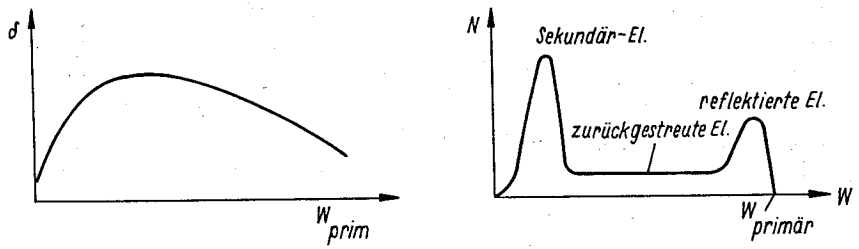
Steigert man die an einer kalten Katode anliegende elektrische Feldstärke auf sehr hohe Werte $E > 10^8\ V \cdot m^{-1}$, so erfolgt eine Elektronenemission; diese Feldelektronenemission ist ein nur wellenmechanisch erklärbarer Effekt. Ist die de Broglie-Wellenlänge eines Elektrons innerhalb der Katode vergleichbar oder größer als die Breite des Potentialwalls im Bild des Potentialtopfes, so besteht eine gewisse Wahrscheinlichkeit dafür, daß das Elektron den Potentialwall durchtunnelt: Tunneleffekt. Es benötigt also nicht die Mindestenergie $W_F + W_a$ wie beim Fotoeffekt und der thermischen Emission, um ihn zu überwinden.

Anwendung im Feldelektronenmikroskop sowie zur Erzeugung von Elektronenstrahlen kleiner Öffnung und hoher Stromdichte aus spitzen Katoden.

Sekundärelektronenemission

Treffen auf die Oberfläche eines festen Körpers Teilchen auf, so beobachtet man bei ausreichender Energie der Primärteilchen die Emission von Elektronen: Sekundärelektronenemission. Sie wird durch den Sekundäremissionskoeffizienten δ charakterisiert: δ bedeutet bei Beschuß mit Elektronen das Verhältnis der Summe der reflektierten primären und der ausgelösten Sekundärelektronen zur Zahl der auftreffenden Primärelektronen. Sind die primären Teilchen Ionen oder metastabile Atome, so wird δ in ähnlicher geeigneter Weise definiert. Bei einem bestimmten Material hängt δ von der Energie der Primärelektronen, ihrem Auftreffwinkel auf die Oberfläche sowie deren Zustand (Rauheit) ab. Ein Teil der Primär-

elektronen wird reflektiert, andere werden mit Energieverlust zurückgestreut. Dies sind nicht die eigentlichen Sekundärelektronen, letztere haben nach dem Austritt nur kleine kinetische Energien bis zu ca. 5 eV.



Der Verlauf von $\delta = f(W_{prim})$ hat für alle untersuchten Materialien im wesentlichen den gleichen qualitativen Verlauf: δ wächst bis zu einem Maximum bei $W_{prim} \approx 400 \div 600$ eV und fällt danach langsam ab. Für Metalle liegt δ_{max} in der Nähe von 1. Im Vergleich zu anderen Arten der Elektronenemission nimmt die SE-Emission infolge ihrer relativ großen Unabhängigkeit von der Art des untersuchten Materials eine Ausnahmestellung ein. Während sich z. B. die Werte für die Dichte des thermischen Elektronenstroms (62) verschiedener Materialien bei gleicher Temperatur um viele Größenordnungen voneinander unterscheiden, liegen die Werte δ_{max} aller bekannten Materialien einschließlich der hierfür untersuchten kompliziert zusammengesetzten Halbleiter zwischen etwa 0.5 und 20. Die geringe Abhängigkeit von der Austrittsarbeit W_a erklärt sich aus der großen Energie der Primärelektronen $W_{prim} \gg kT$ und der daher großen mittleren Energie der Sekundärelektronen. Letztere erleiden auf dem Weg zur Oberfläche Energieverluste, die größer als die Austrittsarbeit sind. Im Gegensatz dazu liegt die mittlere kinetische Energie der thermisch ausgelösten Elektronen wenigstens um eine Größenordnung unterhalb der Austrittsarbeit.

Technisch angewendete Sekundäremissionskatoden

[Ag] - Cs_2O, Ag, Cs - Cs hat außer einer hohen Lichtempfindlichkeit ebenfalls eine gute SE-Ausbeute von $\delta_{max} \approx 12$ bei $W_{prim} \approx$ 400 eV. Brauchbare, wenn auch nicht ganz so hohe Werte für δ_{max}

erreicht man mit $[SbCs_3]$ -Cs. Beide Typen finden Anwendung in Fotovervielfachern mit Vervielfachungsfaktoren bis zu $M \approx 10^8$. Anwendung in vielen Gebieten von Wissenschaft und Technik zur Messung sehr schwacher Lichtströme.

Andere Schichten wie z. B. Cu-Be, Ni-Be, Ag-Mg u.a. enthalten nicht das chemisch sehr aktive Cäsium, sie sind daher nach geeigneter Formierung luftbeständig. Dadurch wird ihre Handhabung sehr vereinfacht. SE-Vervielfacher mit derartigen Elektroden finden mit großem Erfolg bei der Messung sehr geringer Ströme von Ionen und Elektronen bis zur Zählung einzelner auffallender primärer Ionen, Elektronen u.a. Anwendung.

8. Bewegung von Ladungsträgern in elektromagnetischen Feldern

Bei vielen üblichen Anwendungen freier Ladungsträger, z. B. von Elektronenstrahlen in der Fernseh-Bildwiedergaberöhre, ist der Raum, nach (17) charakterisiert durch d, immer sehr groß gegen die de Broglie-Wellenlänge: $d \gg \lambda$. Somit kann die klassische Teilchenvorstellung angewendet werden. Bei Beschränkung auf nichtrelativistische Geschwindigkeiten $\dot{\vec{r}} \ll c$ gilt das Gesetz von Newton

(1) $\dot{\vec{p}} = m \cdot \ddot{\vec{r}} = \vec{F}$

Wirken elektrische und magnetische Felder auf das geladene Teilchen ein, so gilt für die resultierende Kraft

$$\vec{F} = q \cdot \vec{E} + q \left(\dot{\vec{r}} \times \vec{B} \right)$$

$$m\ddot{\vec{r}} = q \cdot \vec{E} + q \left(\dot{\vec{r}} \times \vec{B} \right) \qquad (65)$$

Multiplikation beider Seiten von (65) mit $\dot{\vec{r}}$:

$$m\ddot{\vec{r}}\dot{\vec{r}} = q \cdot \vec{E} \cdot \dot{\vec{r}} + q\, \dot{\vec{r}} \cdot \left(\dot{\vec{r}} \times \vec{B} \right)$$

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{1}{2} m \dot{r}^2 \right) = -q \cdot \frac{dV}{dt} + 0$$

$$\frac{d}{dt} W_{kin} = -\frac{d}{dt} W_{pot}$$

$$W_{kin} + W_{pot} = const. \qquad \text{Energiesatz!} \qquad (66)$$

Startet ein Elektron zur Zeit $t = 0$ mit der Anfangsgeschwindigkeit $\dot{r}(0) = 0$ am Ort des Potentials $V = 0$, so gilt $W_{kin} + W_{pot} = 0$.

Da $W_{kin} = \frac{1}{2} m \cdot \dot{r}^2$ und $W_{pot} = -e \cdot V$, folgt

$$\frac{1}{2} m \dot{r}^2 = eV \quad oder \quad \dot{r} = \sqrt{\frac{2eV}{m}} = 5.94 \cdot 10^5 \sqrt{V_{Volt}} \; m \cdot s^{-1} \qquad (67)$$

Wirkt ein magnetisches Feld allein, d. h. $\vec{E} = 0$, so gilt

$$\frac{d}{dt} W_{kin} = 0 \qquad W_{kin} = const.$$

d. h. der Ladungsträger ändert seine kinetische Energie $W_{kin} = \frac{p^2}{2m}$, somit auch den Betrag des Impulses p nicht, wohl aber verändert

sich entsprechend (65) der Impulsvektor $\vec{p}$, d. h. die Richtung der Bahn!

Diese Betrachtungen beziehen sich auf statische elektrische Felder, d. h. auf Felder, die sich nur so langsam verändern, daß sich die Bewegung der Ladungsträger von der im konstanten Feld unmerklich unterscheidet. Die Bedingung dafür lautet, daß die Verweilzeit des Trägers im Feld, seine Laufzeit im Feld, klein gegenüber einer die Feldänderung charakterisierenden Zeit sein muß, z. B. der Schwingungsdauer eines Wechselfeldes. Ist dies nicht gegeben, machen sich Laufzeiteffekte bemerkbar, die kinetische Energie ist nicht mehr eine Funktion des Potentials des erreichten Orts: wenn z. B. ein Elektron an der Katode einer Diode mit der Anodenspannung $U_a = U_o \cdot \sin \omega t$ zur Zeit $t = 0$ startet und die Anode zur Zeit T, d. h. bei der Phase der Anodenspannung $wT = \pi$ erreicht, wurde es während des gesamten Fluges in Richtung auf die Anode beschleunigt, muß also mit einer von Null verschiedenen kinetischen Energie W_{kin} an der Anode eintreffen, diese hat jedoch zum Zeitpunkt des Eintreffens das Potential Null! -
Außerdem ändern sich die Bahnen der Ladungsträger stark gegenüber dem Fall der Bewegung in statischen Felden, dabei spielt die Phase des Feldes zum Zeitpunkt des Eintritts des Trägers in das Feld eine entscheidende Rolle.

Unter Beachtung der Anfangsbedingungen ist für jedes Problem von Gleichung (65) auszugehen, die drei skalare Gleichungen umfaßt:

$$\begin{aligned} m\ddot{x} &= q \cdot E_x + q \left(\dot{y} \cdot B_z - \dot{z} \cdot B_y \right) \\ m\ddot{y} &= q\, E_y + q \left(\dot{z} \cdot B_x - \dot{x} \cdot B_z \right) \\ m\ddot{z} &= q\, E_z + q \left(\dot{x} \cdot B_y - \dot{y} \cdot B_x \right) \end{aligned} \qquad (67)$$

Detailliertere Betrachtung der Bewegung im elektrischen Feld
In einer Diode mit planparallelen Elektroden, Abstand l, herrscht ein von einer Batterie der Spannung U_B aufgebautes elektrisches Feld $E = \frac{U_b}{l}$. Werden auf geeignete Weise unmittelbar vor der Oberfläche der negativen Elektrode gleichzeitig N Elektronen erzeugt, so werden diese im elektrischen Feld beschleunigt und bewegen sich auf die positive Elektrode zu: es fließt der Strom i. Bei der Be-

wegung um die Strecke dx in der Zeit dt nehmen die Elektronen die Energie $N \cdot e \cdot E \cdot dx$ auf, die von der Batterie geliefert werden muß:

$$N \cdot e \cdot E \cdot dx = U_b \cdot i \cdot dt$$

$$i = \frac{N \cdot e}{l} \cdot v \qquad \frac{dx}{dt} = v$$

Aus (65) folgt $v = \frac{eE}{m} \cdot t$

somit $$i = \frac{N \cdot e^2 \cdot E}{l \cdot m} \cdot t \tag{68}$$

Der Strom beginnt von Null an linear mit der Zeit bis zu seinem Endwert, der bei Eintreffen der Elektronen an der positiven Elektrode erreicht wird, zu steigen. Also schon lange vor dem Eintreffen der Elektronen fließt ein Strom. Treten aus der negativen Elektrode dauernd Elektronen aus, so setzt sich der gemessene Gleichstrom aus den Einzelimpulsen jedes Elektrons zusammen. Da die Elektronen unabhängig voneinander austreten, wird ihre Zahl und damit die Zahl ihrer Einzelimpulse in kleinen Zeitintervallen nicht völlig gleich sein, d. h. der Gleichstrom zeigt bei der Messung mit empfindlichen Meßinstrumenten Schwankungen (s. 74).

Ist die Diode mit Gas gefüllt, so stoßen die Elektronen mit den Gasatomen, die sich entsprechend der kinetischen Gastheorie (s. Abschnitt 5) in chaotischer Wimmelbewegung befinden, ebenso zusammen wie die Gasatome untereinander. Die Elektronen erfahren aber während des Durchfliegens ihrer freien Weglänge (39) eine Beschleunigung durch das elektrische Feld. Dadurch wird ihrer chaotischen Bewegung, die sie entsprechend der Maxwell'schen Verteilung mit der mittleren Geschwindigkeit $\bar{v}$ ausführen, eine Bewegungskomponente von der Katode zur Anode überlagert:

Driftgeschwindigkeit v_{drift}

$$\vec{v}_{Drift} = \frac{q}{|q|} \cdot \mu \cdot \vec{E} \tag{69}$$

Beweglichkeit $$\mu \sim \frac{\lambda_s}{m \cdot \bar{v}} \sim \frac{\lambda_s}{\sqrt{m \cdot T}} \tag{70}$$

Anstelle (68) ergibt sich $i = \frac{N \cdot e \cdot \mu}{l} \cdot E$ d. h. zeitunabhängig. (71)

Überträgt man diese Überlegungen auf die Bewegung des Elektronengases im Metall, die durch Streuung an/Zusammenstößen mit den Ionen des Gitters behindert wird, so folgt

$$\vec{G} = (-e) \cdot n \cdot \vec{v}_{Drift} = (-e) \cdot n \cdot \left(\frac{-e}{e} \cdot \mu_n \cdot \vec{E} \right)$$

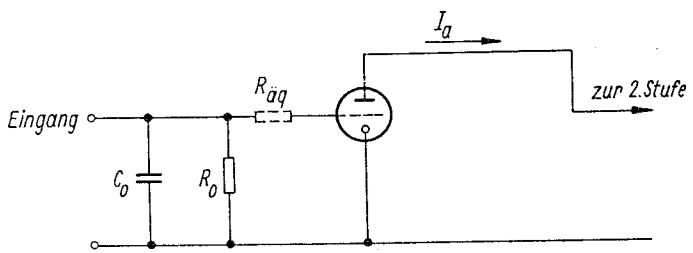
$$\vec{G} = e \cdot n \cdot \mu_n \cdot \vec{E} \quad = \chi \cdot \vec{E} \qquad \text{Ohm} \qquad (72)$$

9. Rauscherscheinungen

Da der Elektrizitätstransport durch Elektronen erfolgt, ihre während der Zeiteinheit durch den Querschnitt eines Leiters tretende oder von einer Katode emittierte Anzahl statistischen Schwankungen unterworfen ist, beobachtet man Erscheinungen, "Rauschen", die die Empfindlichkeit und Genauigkeit von Meßinstrumenten begrenzen. Bei vielen Messungen/Meßverfahren ist es daher erforderlich, den Rauschpegel durch geeignete Dimensionierung und andere Maßnahmen so klein wie möglich zu machen, um ein möglichst kleines Signal mit ausreichend kleinem Fehler messen zu können. Entscheidend dafür ist das Signal-zu-Rausch-Verhältnis.

Rauschquelle der Eingangsstufe eines elektronischen Meßgeräts

In den meisten Fällen genügt die Untersuchung der Rauschquellen der Eingangsstufe; denn am Eingang der zweiten und folgenden Stufen ist das Signal bereits verstärkt.



Schrotrauschen des Anodenstroms I_a: $\overline{(\Delta i_s)^2} = 2e \cdot I_a \cdot F^2 \cdot \Delta f$ (73)

Raumladungsglättungsfaktor $F^2 = 0.12 \frac{S}{I_a}$

Bezogen auf das Steuergitter der Röhre ergibt sich entsprechend der Definition der Steilheit S

$$\overline{(\Delta u_s)^2} = \frac{0.24 \cdot e}{S} \cdot \Delta f \qquad (74)$$

Funkelrauschen wird durch relativ langsame Strukturänderungen kleiner Katodenbereiche hervorgerufen; muß bei $f < 50$ kHz berücksichtigt werden.

$$\overline{(\Delta u_f)^2} = \frac{10^{-13}}{f}\,\Delta f \qquad (75)$$

Rauschen des Gitterstroms, der eine negative und eine positive Komponente hat. Beide Stromkomponenten unterliegen unabhängig voneinander statistischen Schwankungen. Im Gitterkreis ist nur ihre Differenz meßbar!

$$\overline{(\Delta i_g)^2} = 2e\left(|Ig_+| + |Ig_-|\right)\cdot\Delta f \qquad (76)$$

An der Eingangsimpedanz $z = R_o \parallel C_o = \frac{R_o}{1 + j w R_o C_o}$ entsteht eine Rauschspannung

$$\overline{(\Delta u_g)^2} = 2e\,|Ig_+|\,\frac{R_o^2}{1+w^2R_o^2C_o^2}\cdot\Delta f \qquad (77)$$

da meist $|Ig_-| \ll |Ig_+|$.

Widerstandsrauschen (Johnson-Effekt)

Auf Grund der chaotischen Wimmelbewegung des Elektronengases treten an den Enden des Widerstands statistisch schwankende Potentialdifferenzen auf. Da die bei Anlegen eines elektrischen Feldes entstehende Driftgeschwindigkeit (69) sehr klein gegen die mittlere thermische Geschwindigkeit der Elektronen ist, hängt das Widerstandsrauschen nicht von der Größe des den Widerstand durchfließenden Stromes ab.

Nach Nyquist gilt $\overline{(\Delta u_{th})^2} = 4kT\cdot R_W\cdot\Delta f$ (78)

für die mittlere quadratische Rauschspannung an einem Widerstand, dessen Wirkkomponente R_W ist.

Über der Eingangskapazität C_o entsteht somit

$$\overline{(\Delta u_{th})^2} = \frac{4k\cdot T\,R_o}{1+w^2R_o^2C_o^2}\cdot\Delta f \qquad (79)$$

Es ist üblich, mit Hilfe von (78) das Schrotrauschen des Anodenstroms (74) durch das Widerstandsrauschen eines gedachten äquivalenten Rauschwiderstands $R_{äq}$ auszudrücken, dessen Größe sich aus (74) und (78) ergibt:

$$R_{äq} = \frac{0.24 \cdot e}{4\,kT \cdot S} \approx \frac{2.5}{S_{A/V}} \quad \Omega$$

Für die gesamte auf das Gitter der Röhre bezogene Rauschspannung erhält man

$$\sqrt{\overline{(\Delta u)^2}} = \left[\left(4\,k \cdot T \cdot R_{äq} + \frac{2\pi \cdot 10^{-13}}{w} + \frac{2e\,Ig_+ R_0^2}{1+w^2 R_0^2 C_0^2} + \frac{4\,kT\,R_0}{1+w^2 R_0^2 C_0^2} \right) \Delta f \right]^{1/2}$$

Häufig gilt bei Verstärkern $wR_0C_0 \gg 1$. Dann kann man schreiben:

$$\overline{(\Delta u)^2} = \frac{1}{C_0^2} \left(a + \frac{b}{w} + \frac{c}{w^2} \right) \cdot \Delta f \qquad (80)$$

$$a = 4\,kT\,R_{äq} \cdot C_0^2 \qquad b = 2\pi \cdot 10^{-13} \cdot C_0^2 \qquad c = 2e\,Ig_+ + \frac{4kT}{R_0}$$

Es muß darauf hingewiesen werden, daß nur die wesentlichen Rauschquellen behandelt wurden. Grundsätzlich muß der Summand a in (80) durch weitere Glieder, die den Rauschbeitrag des Anodenwiderstands der Eingangsröhre, des äquivalenten Rauschwiderstands der zweiten Röhre usw.* ergänzt werden. Weiterhin darf nicht übersehen werden, daß nur die nicht vermeidbaren, durch physikalische Elementarprozesse bedingten Rauschquellen einbezogen wurden. Außer diesen können jedoch noch weitere technologisch bedingte Störquellen wie das Stromrauschen von Kohleschichtwiderständen, der Mikrophonieeffekt von Elektronenröhren, Leckströme von Transistoren, Störimpulse aus Elektrolytkondensatoren usw. auftreten.

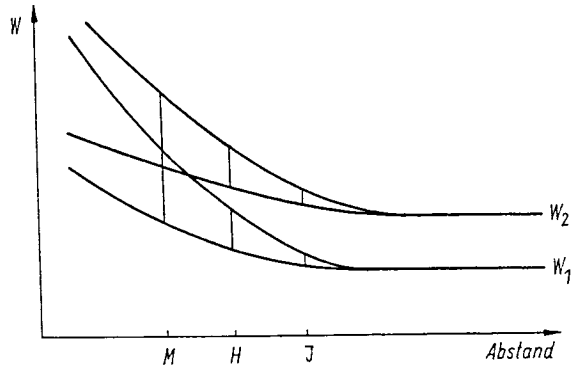
* erfassen,

10. Kollektive von Elektronen in Halbleitern

Ein Elektron erleidet auf seinem Weg durch einen Kristall "Zusammenstöße", diese werden durch Abweichungen von der idealen Struktur, durch eine gestörte Gitterperiodizität bewirkt: thermische Schwingungen der Gitterbausteine, Fremdatome, Leerstellen, Baufehler. Somit sollte der elektrische Widerstand eines idealen Kristalls mit sinkender Temperatur bis auf Null abnehmen; der Widerstand eines realen Kristalls müßte dagegen eine untere Grenze besitzen, die durch die Konzentration der Fremdatome, Leerstellen und Baufehler bestimmt wird.
Vergleich mit experimenteller Erfahrung ergibt, daß Metalle dieses Verhalten zeigen, Halbleiter und Isolatoren jedoch nicht. Deren elektrischer Widerstand ist sehr viel größer als der der Metalle und nimmt im allgemeinen mit steigender Temperatur ab.
Das in Abschnitt 6 behandelte Modell des Potentialtopfs mit konstantem Potential im Innern muß durch Berücksichtigung der räumlichen Gitterperiodizität, also Annahme eines periodischen Potentials im Innern des Potentialtopfs, modifiziert werden.
So wie das Pauli-Prinzip (Abschnitt 4) die Beschreibung durch ein Energieband (53) ergibt, führt die weitere Verfeinerung des Modells durch Berücksichtigung des periodischen Potentials zu folgender Auffassung: die Elektronen können nicht mit beliebiger Energie existieren, vielmehr folgen in der Skala der Energien verbotene und erlaubte Bereiche aufeinander; die erlaubten Bereiche werden ebenfalls "Energiebänder" genannt.

Veranschaulichung der Vorstellung von Energiebändern

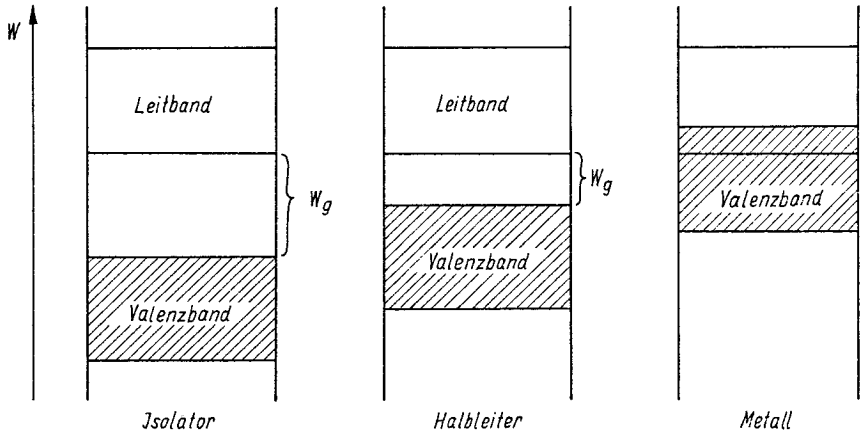
Gedankenexperiment: zwei identische Atome sind soweit voneinander entfernt, daß keine gegenseitige Wechselwirkung auftritt. Wird ihr Abstand verringert, spaltet jeder Energiewert in zwei Werte auf, sobald die Wechselwirkung merkbar wird, um dem Pauli-Prinzip Genüge zu tun. Wegen größerer Kernnähe, d. h. stärkerer Bindung der Elektronen, spaltet der Wert W_1 erst bei größerer Annäherung der Atome als der Wert W_2 auf.
In einem Kristall von $V = 1\ cm^3$ des Elements Silizium sind $5 \cdot 10^{22}$ Siliziumatome enthalten, somit spaltet jeder Energiewert



in $5 \cdot 10^{22}$ Einzelwerte auf: Energiebänder. Da die interessierenden Energiebänder eine Breite von ca. 1 eV haben, wird deutlich, daß die Abstände dieser Einzelwerte voneinander außerordentlich klein sind, ca. 10^{-22} eV. Die inneren Energiebänder sind wegen der festeren Bindung der Elektronen und der demzufolge geringeren Wechselwirkung schmaler.

Das oberste ohne Energiezufuhr besetzte Zustände enthaltende Band wird als Valenzband bezeichnet, da die in ihm enthaltenen Elektronen die Valenzelektronen der Atome sind. Die Lösung der Schrödinger-Gleichung (18) unter Beachtung der Periodizität der potentiellen Energie W_{pot} der Elektronen führt streng zur Energiebandstruktur.
Klassische Analoga: werden zwei gleiche elektrische Schwingkreise mit der Eigenfrequenz f_o gekoppelt, so treten in dem dadurch entstandenen System zwei Frequenzen $f_1 > f_o$ und $f_2 < f_o$ auf: die Frequenz f_o "spaltet auf" und zwar um so mehr, je stärker die Kopplung beider Schwingkreise wird. Gleiches Verhalten zeigen zwei gekoppelte mechanische Oszillatoren.

Das oben beschriebene Gedankenexperiment ist in Wirklichkeit selbstverständlich nicht durchführbar, da man die Gitterkonstante eines Kristalls nicht verändern kann. Für gegebene Gitterkonstanten lassen sich jedoch verschiedene schematische Energieband-Darstellungen ablesen:



Bei T = 0 K sind alle zulässigen Energiezustände bis zu bestimmter maximaler Energie besetzt und darüber leer:

a) das letzte Energieband ist voll besetzt: Valenzband. Das nächste zulässige Energieband darüber ist völlig leer und von diesem durch eine verbotene Zone der Breite Wg von einigen Elektronenvolt getrennt: Isolator.

z.B. Diamant $Wg \approx 7$ eV

b) wie unter a), aber $Wg \approx 1$ eV : Halbleiter

z.B. Germanium $Wg \approx 0.66$ eV , Silizium $Wg \approx 1.15$ eV .

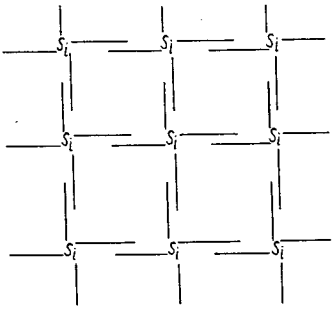
c) Überlappung der Energiebänder ergibt teilweise bis zur Energie W_F (53) gefülltes Band: Metall.

Das nächste über dem Valenzband im Abstand Wg befindliche Energieband wird Leitfähigkeits- oder kurz Leitband genannt. Bei T = 0 K ist keiner seiner zulässigen Zustände von Elektronen besetzt, es ist leer.

Halbleiter und Isolatoren unterscheiden sich also nur durch die Breite Wg der verbotenen Zone; bei Halbleitern bedarf es einer kleineren thermischen Anregung, d. h. Temperatur, um Zustände im Leitband durch Elektronen aus dem Valenzband zu besetzen; bei höherer thermischer Anregung, d. h. Temperatur, wird demnach aus dem Isolator ein Halbleiter. Bei genügend tiefen Temperaturen wird aus

dem Halbleiter ein Isolator.

Die Elemente Kohlenstoff, Germanium und Silizium haben 4 Elektronen ($n\,s^2$, $n\,p^2$) in der äußeren Schale (24) und die gleiche stabile Diamantstruktur mit homöopolarer Bindung: Nachbaratome gehen Bindungen durch Paare von Elektronen entgegengesetzten Spins ein. Vereinfachte zweidimensionale Darstellung:



Durch Zuführung ausreichender Energie, z. B. Licht oder thermische Anregung bei $T > 0$ K werden Bindungen aufgebrochen: das frei werdende Elektron kann einen Zustand im Leitband besetzen, es hinterläßt im Valenzband eine fehlende Bindung, ein Loch. Gleichzeitig entstehen somit ein Elektron und ein Loch: Generation. Auch der entgegengesetzt verlaufende Prozeß tritt auf; ein Leitungselektron füllt unter Energieabgabe ein Loch auf: Rekombination. Gleichgewicht zwischen beiden Prozessen bestimmt die stationäre Zahl von Elektronen und Löchern bei gegebener Temperatur.

Generation = g

Rekombination = $r \cdot n_i \cdot p_i$

Gleichgewicht: $g = r \cdot n_i \cdot p_i$

$$n_i \cdot p_i = n_i^2 = \frac{g}{r} = f(T) \text{ , da } n_i = p_i \qquad (81)$$

Die Elektronen im Leitband haben genügend freie Zustände zur Verfügung, in die sie durch Energieaufnahme aus einem angelegten elektrischen Feld übergehen können: sie bewirken dann also einen Stromfluß. Auch im Valenzband kommt ein Stromfluß zustande, weil einige Elektronen freie Zustände (Löcher) vorfinden, auf die sie übergehen können: Lochleitung. Ein freier Zustand, ein Loch, am

Valenzband verhält sich gegenüber einem angelegten Feld wie ein positiv geladenes Teilchen. Sind sämtliche Zustände im Valenzband besetzt bei $T = 0\ K$, kann somit kein Strom fließen. Die beiden Leitungsarten: Elektronen- oder Überschußleitung und Loch- oder Defektleitung sind völlig gleichberechtigt und unterscheiden sich nur durch das Vorzeichen der Ladung ihrer Träger.
Eindrucksvoller experimenteller Beweis: Halleffekt; an einem stromdurchflossenen Kristall, der sich in einem Magnetfeld $\vec{B} \perp \vec{E}$ befindet, entsteht nach (65) eine Transversalspannung senkrecht zu $\vec{B}$ und $\vec{E}$, deren Vorzeichen und Größe Aussagen über die Art der Ladungsträger und ihre Konzentration gestatten.

Für ein Elektron im Kristall gilt die Bewegungsgleichung (1)

$$\dot{\vec{p}} = m\ddot{\vec{r}} = \vec{F}_{total} = \vec{F}_{Kristall} + \vec{F}_{äußere}$$

Die innerhalb des Kristalls wirkenden Kräfte $\vec{F}_{Kristall}$ sind ziemlich komplex und häufig schwer zu berechnen. Ein Ausweg ist die Benutzung der Gleichung

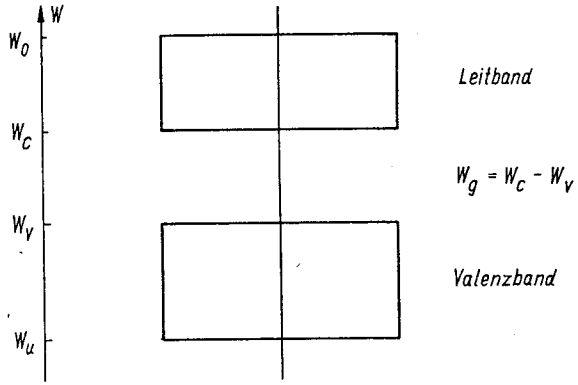
$$m_n \cdot \ddot{\vec{r}} = \vec{F}_{äußere} \qquad (82)$$

durch geeignete Wahl der Größe der effektiven Masse m_n für Elektronen und m_p für Löcher. Aus der Definition geht hervor, daß die effektive Masse von der Bewegungsrichtung der Ladungsträger im Kristall abhängt. Meist wird bei Messungen über alle Richtungen gemittelt:

$$T = 300\ K \quad \text{Silizium} \quad m_n = 1.18\ m \qquad m_p = 0.81\ m\ .$$

Konzentration der Ladungsträger im Halbleiter (Eigenleitung)

Voraussetzungen: die Elektronen im Leitband bzw. die Löcher im Valenzband werden als Maxwellgase angesehen, die in Potentialtöpfe der konstanten potentiellen Energien W_c bzw. W_v eingeschlossen sind.



Analog zu (54) gilt:

$$n_i = 4\pi \left(\frac{2m_n}{h^2}\right)^{3/2} \int_{W_c}^{W_0} \frac{(W - W_c)^{1/2} \cdot dW}{\exp\left(\frac{W - W_{F_i}}{kT}\right) + 1} \tag{83}$$

als Bestimmungsgleichung für die Konzentration n_i der Elektronen im Leitband. Wenn $W - W_{F_i} > 2\ kT$, ist $exp\left(\frac{W-W_{F_i}}{kT}\right) \gg 1$ und statt der Fermi-Dirac-Verteilung kann in dieser Näherung die Maxwell-Boltzmann-Verteilung verwendet werden. Da diese bei hohen Werten von W schnell kleiner wird, kann ohne wesentlichen Fehler statt der Integrationsgrenze W_o = Energie der Oberkante des Leitbandes $W_o = \infty$ gesetzt werden.

$$n_i \approx 2\left(\frac{2\pi m_n \cdot kT}{h^2}\right)^{3/2} \cdot e^{-\frac{W_c - W_{F_i}}{kT}} = N_{eff}^{n} \cdot e^{-\frac{W_c - W_{F_i}}{kT}} \tag{84}$$

Mit gleichen Überlegungen ergibt sich:

$$p_i \approx 2\left(\frac{2\pi m_p \cdot kT}{h^2}\right)^{3/2} \cdot e^{-\frac{W_{F_i} - W_v}{kT}} = N_{eff}^{p} \cdot e^{-\frac{W_{F_i} - W_v}{kT}} \tag{85}$$

Bestimmung der Fermi-Energie W_{F_i}

Aus $n_i = p_i$ (81) folgt

$$W_{F_i} = W_V + \frac{W_g}{2} + \frac{3kT}{4} \ln \frac{m_p}{m_n} \tag{86}$$

Solange das Verhältnis der effektiven Massen der Ladungsträger nicht sehr groß ist, gilt

$$W_{F_i} \approx W_V + \frac{W_g}{2}$$ also praktisch temperaturunabhängig. (87)

Mit (86) ergibt sich aus (84) bzw. (85)

$$n_i = p_i = \left(N^n_{eff} \cdot N^p_{eff} \right)^{1/2} \cdot e^{-\frac{W_g}{2kT}} \tag{88}$$

$$n_i \cdot p_i = n_i^2 = N^n_{eff} \cdot N^p_{eff} \cdot e^{-\frac{W_g}{kT}} \tag{89}$$

Das Produkt $n_i \cdot p_i$ ist also von W_F unabhängig!

Für Silizium:

$$n_i \cdot p_i = 1.5 \cdot 10^{33} \cdot T^3 \cdot e^{-\frac{1.21}{kT}} \, cm^{-6} \tag{90}$$

(In diesen Ausdruck wurde die geringe Temperaturunabhängigkeit von Wg hineingenommen)

Bei $T = 300$ K ist für Silizium $n_i = p_i = 1.5 \cdot 10^{10}$ cm^{-3}
Germanium $= 2.5 \cdot 10^{13}$ cm^{-3} (91)

Aus den Werten n_i und p_i (91) sowie den Beweglichkeiten der Ladungsträger läßt sich der spezifische Widerstand der ideal reinen Halbleiter bei $T = 300$ K berechnen:

$$\varrho_i = \frac{1}{e \cdot n_i \cdot \mu_n + e \cdot p_i \cdot \mu_p} = \frac{1}{e \cdot n_i (\mu_n + \mu_p)} \tag{92}$$

Silizium: $\mu_n = 1350$ cm$^2 \cdot$V^{-1}s^{-1} $\varrho_i = 2.27 \cdot 10^5$ Ω cm
$\mu_p = 480$ "

Germanium: $\mu_n = 3900$ cm$^2 \cdot$V^{-1}s^{-1} $\varrho_i = 43.5$ Ωcm
$\mu_p = 1900$ "

Störstellen-Halbleitung

Germanium- oder Siliziumeinkristalle müssen, falls man den spezi-

fischen Widerstand der Eigenleitung (92) anstrebt, von extrem hoher Reinheit sein; denn bereits eine äußerst geringe Zahl von Störstellen, z. B. Fremdatome, liefert soviele zusätzliche Ladungsträger, daß die Eigenleitung vollständig überdeckt wird. Diese außerordentlich hohen Ansprüche an die Reinheit des Materials bildeten sehr lange das Haupthindernis zur quantitativen Erforschung von Halbleitereigenschaften. - Auf dem gezielten Einbau von Störstellen (Dotierung) in einen zunächst weitgehend reinen Halbleiter beruht die Technologie der elektronischen Halbleiterbauelemente sowie der integrierten Mikroelektronik.
Störstellenatome der 3. und 5. Gruppe des Periodensystems der Elemente spielen bei den Halbleitern Germanium und Silizium, die der 4. Gruppe angehören, die ausschlaggebende Rolle.

Atome der Elemente Phosphor, Arsen oder Antimon werden anstelle eines Siliziumatoms "substitutionell" in das Kristallgitter eingebaut. Nur vier der fünf Valenzelektronen dieser Atome können in den homöopolaren Paarbedingungen aufgenommen werden, das fünfte Elektron bleibt nur sehr schwach an das Fremdatom gebunden. Die Energie, die man aufwenden muß, um es vom zugehörigen Atomrest abzutrennen und für die Stromleitung freizumachen, ist sehr viel geringer als die Energie für das Aufbrechen einer Bindung zwischen zwei Si-Atomen; die Ionisierungsenergien der Störstellenatome (Donatoren) betragen in Silizium

für P 0,044 eV, für As 0,049 eV, für Sb 0,039 eV.

Nach Abgabe des fünften Valenzelektrons ist der Donator positiv geladen.

Substitutionsatome der 3. Gruppe wie Bor, Aluminium erzeugen zusätzliche Löcher; sie besitzen nur drei Valenzelektronen, so daß ein Platz in den Bindungen zu den benachbarten Siliziumatomen unbesetzt bleibt, ein Loch, in das mit geringem Energieaufwand ein Elektron aus einer anderen Bindung nachrücken kann. Die Energien zur Bildung negativ geladener Störstellenatome (Akzeptoren) betragen in Silizium

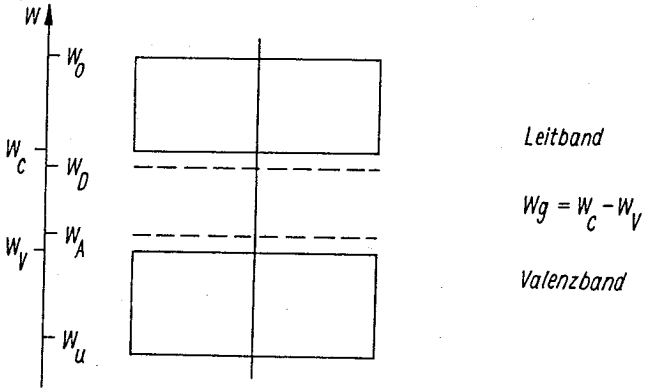
für B 0,045 eV, für Aluminium 0,057 eV.

In einem Halbleiter mit Störstellen entstehen Elektronen und Löcher nicht mehr paarweise wie bei der Eigenleitung, d. h. ihre Konzentrationen n bzw. p brauchen nicht mehr gleich zu sein:

$n > p$ n-Leitung in n-Material
Elektronen ≙ Majoritätsladungsträger
Löcher ≙ Minoritätsladungsträger

$p > n$ p-Leitung in p-Material
Löcher ≙ Majoritätsladungsträger
Elektronen ≙ Minoritätsladungsträger

Konzentration der Ladungsträger im Halbleiter (Störstellen-Halbleitung)



Voraussetzungen wie für (83): Ladungsträger werden als Maxwellgase abgesehen.

Neutralitätsbedingung: $p + N_D^+ = n + N_A^-$ (93)

$$N_{eff}^{p} \cdot e^{-\frac{W_F - W_V}{kT}} + \frac{N_D}{2\exp\left(-\frac{W_D - W_F}{kT}\right) + 1} = N_{eff}^{e} \cdot e^{-\frac{W_c - W_F}{kT}} + \frac{N_A}{2\exp\left(-\frac{W_F - W_A}{kT}\right) + 1}$$

Setzt man $e^{\frac{W_F}{kT}} = x$, so erhält man eine Gleichung 4. Grades für x, d. h. zur Bestimmung der Fermienergie W_F, mit den durch Vergleich mit (93) definierten Abkürzungen α , β , γ , δ :

$$\frac{\gamma}{x} + \frac{N_D}{\delta \cdot x + 1} = \alpha \cdot x + \frac{N_A}{\frac{\beta}{x} + 1} \tag{94}$$

Beispiel: $N_A = 0\ cm^{-3}$; Temperatur so niedrig, daß Eigenleitung vernachlässigt werden kann, d. h. $p \approx 0$; Dotierung durch N_D.

Aus (93) und (94) ergibt sich in diesem Fall

$$N_D^+ \approx n \qquad \frac{N_D}{\delta \cdot x + 1} = \alpha \cdot x \tag{95}$$

Auflösung der quadratischen Gleichung (95) nach x bzw. W_F ergibt

$$W_F = W_D + kT \cdot ln \left\{ -\frac{1}{4} + \sqrt{\frac{1}{16} + \frac{N_D}{2 \cdot N_{eff}^n} \cdot e^{\frac{W_C - W_D}{kT}}} \right\} \tag{96}$$

Für kleine Werte von T ist $e^{\frac{W_C - W_D}{kT}}$ eine große Zahl:

$$W_F \approx W_D + kT \cdot ln \sqrt{\frac{N_D}{2\, N_{eff}^n} \cdot e^{\frac{W_C - W_D}{kT}}}$$

$$W_F \approx \frac{W_C + W_D}{2} + \frac{kT}{2}\, ln \frac{N_D}{2\, N_{eff}^n} \tag{97}$$

Durch Einsetzen von W_F (97) in (84) erhält man für die Elektronendichte bei niedrigen Temperaturen:

$$n \approx N_D^{1/2} \cdot \sqrt{\frac{N_{eff}^n}{2} \cdot e^{-\frac{W_C - W_D}{2kT}}} \tag{98}$$

Für hohe Werte von T ist der zweite Summand unter der Wurzel in (96) sehr klein gegen 1, d. h.

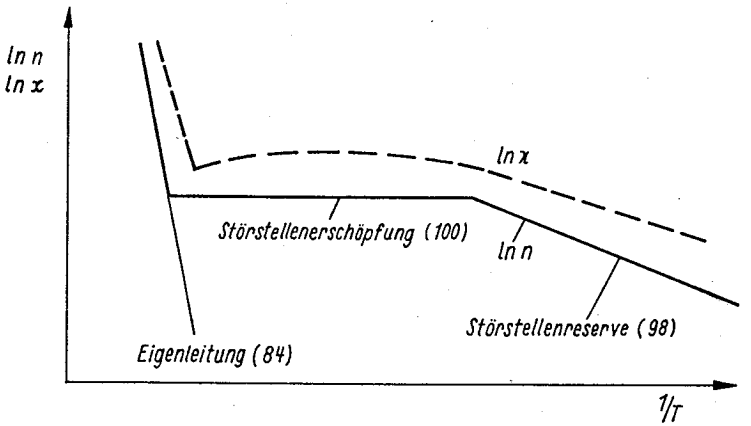
$$W_F \approx W_D + kT \cdot \ln \left\{ -\frac{1}{4} + \frac{1}{4} \left(1 + \frac{4 N_D}{N_{eff}^n} \cdot e^{\frac{W_C - W_D}{kT}} \right) \right\}$$

$$W_F \approx W_C - kT \cdot \ln \frac{N_{eff}^n}{N_D} \qquad (99)$$

Durch Einsetzen von W_F (99) in (84) erhält man für die Elektronendichte bei höheren Temperaturen

$$n \approx N_D \qquad (100)$$

Dies bedeutet, daß sämtliche Donatoren ionisiert sind, also ihr fünftes Valenzelektron als "Leitungselektron" zur Verfügung gestellt haben: diese Quelle von Elektronen ist somit erschöpft. Bei Zimmertemperatur kann immer mit diesem Zustand der Störstellenerschöpfung gerechnet werden.



(101)

Allgemein gilt	$n = N_{eff}^n \cdot e^{-\frac{W_C - W_F}{kT}}$	$p = N_{eff}^p \cdot e^{-\frac{W_F - W_V}{kT}}$
bei Eigenleitung	$n_i = N_{eff}^n \cdot e^{-\frac{W_C - W_{Fi}}{kT}}$	$p_i = N_{eff}^p \cdot e^{-\frac{W_{Fi} - W_V}{kT}}$
Division ergibt	$n = n_i \cdot e^{+\frac{W_F - W_{Fi}}{kT}}$	$p = p_i \cdot e^{+\frac{W_{Fi} - W_F}{kT}}$

(102)

dies bedeutet: die Abweichung der Trägerdichte n bzw. p in einem Halbleiter von der bei gleicher Temperatur T vorhandenen Trägerdichte n_i bzw. p_i im Eigenhalbleiter wird durch den Unterschied der Fermi-Energie W_F des dotierten Halbleiters von der Fermi-Energie W_{F_i} des Eigenhalbleiters bestimmt.

Aus den beiden Gleichungen (102) erhält man durch Multiplikation:

$$n \cdot p = n_i \cdot p_i = n_i^2 \quad . \tag{103}$$

In einem beliebig dotierten Halbleiter ist unabhängig vom Leitungstyp das Produkt aus Elektronen- und Löcherdichte immer gleich dem Quadrat der Eigenleitungsträgerdichte: bei T = 300 K gilt

für Germanium $n \cdot p = n_i^2 = 6.25 \cdot 10^{26}\ cm^{-6}$ (104)

für Silizium $= 2.25 \cdot 10^{20}\ cm^{-6}$

Die Beweglichkeit der Elektronen und Löcher ist temperaturabhängig. Bei tiefen Temperaturen unterhalb Zimmertemperatur gilt $\mu \sim T^{3/2}$, da mit steigender Temperatur und daher steigender Geschwindigkeit der Ladungsträger die Streuung an Störstellen weniger wirksam wird. Bei höheren Temperaturen oberhalb Zimmertemperatur wird die Bewegung der Ladungsträger vor allem durch die stärker werdenden Gitterschwingungen behindert: $\mu \sim T^{-3/2}$. Unter Berücksichtigung dieser Erkenntnisse ergibt sich für die Temperaturabhängigkeit der Leitfähigkeit $\varkappa$ eines dotierten Halbleiters, im Beispiel eines n-leitenden Halbleiters, der in (101) gestrichelt gezeichnete qualitative Verlauf.

Alle vorstehenden Betrachtungen wurden der Einfachheit halber unter der Annahme durchgeführt, daß n bzw. p so klein sind, daß die Gase der Elektronen und Löcher als klassische Maxwellgase behandelt werden können. Dies ist der Fall, wenn

$$n < N_{eff}^{n} \quad \text{bzw.} \quad p < N_{eff}^{p} \quad .$$

Entsprechend (84) bzw. (85) ist bei T = 300 K

$$N_{eff}^{n} \approx N_{eff}^{p} \approx 2.5 \cdot 10^{19}\ cm^{-3} \tag{105}$$

Somit führen kleinere ($\leq 10^{19}$ cm^{-3}) Trägerkonzentrationen in Halbleitern auf nichtentartete, klassische Elektronen- bzw. Löchergase, während die Elektronengase in Metallen ($\approx 10^{22}$ cm^{-3}) im allgemeinen entartet sind (46). In bestimmten Fällen jedoch, bei sehr starker Dotierung, sind die Trägergase auch in Halbleitern streng wellenmechanisch zu behandeln.

p-n-Übergang

Ein p-n-Übergang wird durch einen Halbleiter-Einkristall, z. B. Silizium, gebildet, in welchem zwei Zonen mit verschiedenem Leitungstyp: p-leitend und n-leitend, aneinandergrenzen. Die beiden Zonen seien relativ stark dotiert; bei T = 300 K ergibt sich

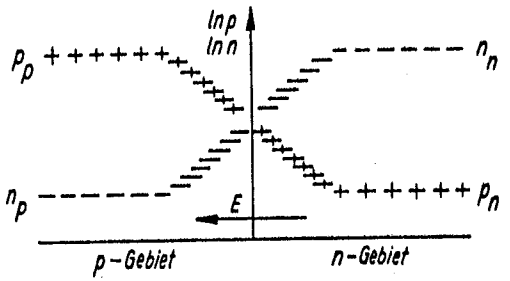
p-Gebiet
$N_A = 10^{17}$ Boratome $\cdot$ cm^{-3}
$p_p = 10^{17}$ Löcher $\cdot$ cm^{-3}
$n_p = \frac{n_i^2}{p_p} = 2250$ Elektronen $\cdot$ cm^{-3}

n-Gebiet
$N_D = 10^{17}$ Phosphoratome $\cdot$ cm^{-3}
$n_n = 10^{17}$ Elektronen $\cdot$ cm^{-3}
$p_n = \frac{n_i^2}{n_n} = 2250$ Löcher $\cdot$ cm^{-3}

Die Konzentrationen der Akzeptoren N_A und der Donatoren N_D ändern ihre Werte an der Trennstelle abrupt. Die Konzentrationen der Löcher und Elektronen, die bei Zimmertemperatur infolge Störstellenerschöpfung (100) im homogenen p- bzw. n-Material mit denen der Akzeptoren: $p_p = N_A$ und der Donatoren $n_n = N_D$ übereinstimmen, machen diese plötzliche Konzentrationsänderung nicht mit: infolge des Konzentrationsgefälles $p_p \longrightarrow p_n$ bzw. $n_n \longrightarrow n_p$ fließen Diffusionsströme (33), die zur gezeichneten Konzentrationsverteilung führen (schematisch).

Mit der Veränderung der Konzentrationen der Ladungsträger in der unmittelbaren Umgebung des p-n-Übergangs entstehen Zonen, in denen die Ladungsneutralität zwischen Ladungsträgern und ionisierten Akzeptoren bzw. Donatoren gestört ist: Raumladungen. Es entsteht ein elektrisches Feld E, das Ströme bewirkt, die den Diffu-

sionsströmen entgegengesetzt gerichtet sind. Das Gleichgewicht wird durch die Bedingung Diffusionsströme = Feldströme bestimmt. In Halbleitern spielen im Gegensatz zu Metallen Diffusionsströme der Ladungsträger eine entscheidende Rolle.



Legt man an den p-n-Übergang eine Spannung, so daß das n-Gebiet negativ gegenüber dem p-Gebiet ist, so werden die Löcher p_p nach rechts, die Elektronen n_n nach links beschleunigt. Die Ladungsträger laufen somit als Minoritätsträger in die Gebiete mit entgegengesetztem Leitungstyp hinein, wo sie allmählich mit den dort in der Überzahl vorhandenen Majoritätsträgern rekombinieren. Da diese verschwindenden Ladungsträger von ihren Gebieten über den äußeren Stromkreis nachgeliefert werden, fließt dauernd ein Strom: Flußrichtung.

Wird die Polarität der angelegten Spannung umgekehrt, so können jeweils nur die in bedeutend geringeren Konzentrationen vorhandenen Minoritätsladungsträger einen Strom tragen: p_n nach links und n_p nach rechts. Da das n-Gebiet keine Löcher bzw. das p-Gebiet keine Elektronen nachliefern kann, erschöpft sich dieser Strom sofort. Infolge der thermischen Generation können zwar auch in diesem Fall dauernd einige Träger nachgeliefert werden, es fließt aber nur ein gegenüber dem Strom in Flußrichtung äußerst kleiner Strom: Sperrichtung. Ein p-n-Übergang hat also Gleichrichter-Eigenschaften.